

ORSAY
Série A,
n° d'ordre
577

THÈSES

PRÉSENTÉES

A LA FACULTÉ DES SCIENCES D'ORSAY UNIVERSITÉ DE PARIS

POUR OBTENIR

LE GRADE DE DOCTEUR ES-SCIENCES PHYSIQUES

PAR

Radovan PADJEN

THEORIE DES DEFORMATIONS NUCLEAIRES

EN PRESENCE DES CORRELATIONS A DEUX PARTICULES ET DEUX TROUS

DEUXIEME THESE

Propositions données par la Faculté

Soutenue le 19 décembre 1969 devant la Commission d'Examen

M.	M. JEAN	Président
Mme	P. BENOIST-GUEUTAL	
M.	C. BLOCH	Examineurs
M.	G. RIPKA	

ORSAY
Série A,
n° d'ordre
577

THÈSES

PRÉSENTÉES

A LA FACULTÉ DES SCIENCES D'ORSAY UNIVERSITÉ DE PARIS

POUR OBTENIR

LE GRADE DE DOCTEUR ES-SCIENCES PHYSIQUES

PAR

Radovan PADJEN

THEORIE DES DEFORMATIONS NUCLEAIRES

EN PRESENCE DES CORRELATIONS A DEUX PARTICULES ET DEUX TROUS

DEUXIEME THESE

Propositions données par la Faculté

Soutenue le 19 décembre 1969 devant la Commission d'Examen

M.	M. JEAN	Président
Mme	P. BENOIST-GUEUTAL	
M.	C. BLOCH	Examineurs
M.	G. RIPKA	

Digitized by the Internet Archive
in 2026



https://archive.org/details/IA41551519_0006

REMERCIEMENTS

Je remercie le Commissariat à l'Energie Atomique pour les facilités de travail aussi bien que pour la bourse Joliot-Curie dont j'ai bénéficié pendant quinze mois.

Je remercie également l'Agence Internationale de l'Energie Atomique pour la bourse dont j'ai été bénéficiaire pendant deux ans.

Madame le Professeur P. Benoist-Gueutal a bien voulu patronner cette thèse et je lui en suis très reconnaissant.

Je remercie très vivement Monsieur le Professeur M. Jean qui a bien voulu accepter la présidence du Jury.

Je suis profondément reconnaissant à Monsieur le Professeur C. Bloch de m'avoir accueilli dans le Service de Physique Théorique du Centre d'Etudes Nucléaires de Saclay.

Je remercie chaleureusement Monsieur Vincent Gillet pour l'aide précieuse et les nombreux encouragements qu'il m'a donnés dès le début de ce travail.

Je ne saurais trop exprimer toute la gratitude que je dois à Monsieur Georges Ripka qui a bien voulu me guider tout au long de ce travail et dont l'amitié et les conseils m'ont toujours été précieux.

Je suis très reconnaissant à Messieurs R. Balian et C. De Dominicis qui ont bien voulu m'initier à leurs méthodes de resommation des diagrammes qui représentent une contribution essentielle à ce travail.

Je tiens à remercier les membres du Service de Physique Théorique, notamment M. Gaudin et M. Rho pour des discussions extrêmement utiles.

Ce travail a exigé de nombreux calculs numériques. Mademoiselle Catherine Chevereau m'a apporté une aide inestimable en tout ce qui concerne les calculs numériques. Je lui en exprime ma très vive reconnaissance.

Je remercie le Département de Calcul Electronique ainsi que Monsieur

Mengin pour les facilités d'accès à l'ordinateur IBM 360-91.

Madame F. Lefèvre a dactylographié le texte avec autant de soin que de rapidité. Madame M. Porneuf a accepté la tâche ingrate de relire et corriger le texte. Je leur en suis extrêmement reconnaissant.

THEORIE DES DEFORMATIONS NUCLEAIRES

EN PRESENCE DES CORRELATIONS

A DEUX PARTICULES ET DEUX TROUS

CHAPITRE 1

INTRODUCTION

Exception faite des modèles entièrement macroscopiques tels que celui de la goutte liquide, toutes les théories de la structure des noyaux ont été basées jusqu'ici sur le modèle de particules indépendantes (ou de quasi-particules pour les noyaux supraconducteurs). Ce modèle suppose l'existence d'un potentiel moyen dans lequel les nucléons occupent les orbites liées les plus basses. Le potentiel moyen peut être soit sphérique, soit déformé.^{[1][7]}

Un grand nombre de calculs ont été effectués dans le but de décrire la déformation du champ moyen à l'aide du modèle de particules indépendantes, c'est-à-dire avec la théorie de Hartree-Fock. Les calculs les plus complets ont été effectués pour les noyaux légers de la couche 1p et de la couche 2s-1d^[6,11,14] et cela parce que le nombre de configurations y est plus restreint que dans les noyaux déformés lourds. Malgré la variété des forces effectives utilisées^[21,22] les résultats des calculs des formes d'équilibre à l'aide de la théorie de Hartree-Fock sont très semblables. Tandis que les calculs de Hartree-Fock sont en bon accord avec les résultats expérimentaux pour les noyaux voisins du ²⁰Ne et du ²⁴Mg, les calculs sont en désaccord avec les résultats expérimentaux pour le ²⁸Si et le ³²S. De façon générale la théorie de Hartree-Fock a une tendance à exagérer la déformation des noyaux dans la deuxième moitié de la couche 2s-1d. Par exemple, elle prédit une forme déformée pour le ³²S alors que ce noyau possède les propriétés d'un noyau sphérique^[12,21] (les propriétés spectroscopiques^[24] du ³¹P suggèrent le couplage faible du proton avec un coeur sphérique du ³²S).

Nous avons donc voulu améliorer l'approximation de Hartree-Fock en ne se limitant plus à une fonction d'onde de particules indépendantes. Plusieurs tentatives ont déjà été faites dans ce sens. Il était naturel de penser aux corrélations de paires du type B.C.S.^[4]. Mais l'application de la théorie de B.C.S. aux noyaux pair-pairs $N=Z$ se heurte à la difficulté qu'on peut former aussi bien des paires d'isospin $T=1$ que des paires d'isospin $T=0$. C'est

pour cela que Chen, Goswami et Kisslinger^[3] ont développé la théorie des paires $T=0$ et ils ont trouvé de telles corrélations dans le ^{24}Mg . D'autre part plusieurs auteurs^[14] ont montré que les noyaux pair-pairs $N=Z$ n'avaient pas de corrélations de paires $T=1$. Nous avons montré^[25] que c'est le terme d'échange de la partie monopole de force effective qui cause une lacune en énergie dans le spectre des orbites de Hartree-Fock et qui rend ces noyaux stables par rapport aux corrélations B.C.S.. En outre nous avons montré que si l'appariement était faible, il était entièrement dominé par des effets parasites dus à la non-conservation du nombre des particules. D'ailleurs, un modèle schématique^[26] et les calculs exacts^[3] montrent qu'avec des fonctions d'onde de B.C.S., il ne se forme qu'un type de paires, à savoir soit $T=0$, soit $T=1$.

Les noyaux pair-pairs $N=Z$ apparaissant donc normaux (non supra-conducteurs) on est amené à calculer par diagonalisation les corrélations dues au mélange des configurations à deux particules et deux trous ($2p-2t$). Une première tentative dans ce sens a été faite par Pal et Stamp^[15,16] mais leur calcul reste incomplet tant pour avoir négligé les configurations les plus importantes que pour avoir négligé les effets parasites dus à la non conservation du moment cinétique.

Nous avons commencé par étudier le mélange des configurations à deux particules et deux trous dans une base déformée, soit de Hartree-Fock soit de Nilsson. Dans les Chapitres 2 et 3 nous discutons les configurations possibles, compte tenu des symétries du champ moyen et le problème de la diagonalisation de ces configurations. Dans le Chapitre 4 nous posons le problème des effets parasites dus à la non conservation du moment cinétique dans le champ moyen déformé et nous montrons comment nous avons éliminé ces effets. Dans le Chapitre 5 nous présentons les résultats du calcul du mélange des configurations à $2p-2t$ dans la couche $2s-1d$ en utilisant les orbites de Nilsson. En particulier, nous étudions dans ce Chapitre le changement de la déformation d'équilibre causée par les corrélations à $2p-2t$. Nous trouvons par exemple que le ^{32}S devient sphérique.

Dans le Chapitre 6 nous présentons une théorie self-consistante des corrélations à $2p-2t$. Dans cette théorie nous calculons explicitement le champ moyen statique vu par un nucléon en présence de toutes les configurations à $2p-2t$. Cette théorie par conséquent va au-delà de la théorie de Hartree-Fock.

Une méthode de resommation des diagrammes en arbre due à C. Bloch, R. Balian et C. De Dominicis^[20] nous permet d'obtenir pour l'énergie du noyau pair-pair une expression simple qui est stationnaire.

Dans le Chapitre 7 nous faisons une application numérique de cette théorie self-consistante aux noyaux de la couche 2s-1d et nous discutons les résultats obtenus.

CHAPITRE 2

L'ESPACE DE CONFIGURATIONS

1. Les orbites dans le champ moyen déformé

Nous allons calculer le mélange des configurations à deux particules-deux trous (2p-2t) aux états déformés. Ces états déformés seront obtenus à partir du modèle de particules indépendantes. Dans ce cas, l'état déformé est décrit par une fonction d'onde à A nucléons (Z protons et N neutrons) qui se déplacent dans les orbites λ d'un potentiel à un corps :

$$|\Phi_0\rangle = b_{\lambda_1}^+ b_{\lambda_2}^+ \dots b_{\lambda_A}^+ |0\rangle \quad , \quad (2.1.1)$$

b_{λ}^+ est un opérateur de création d'un nucléon et $|0\rangle$ est le vide des nucléons. Les orbites λ sont les états propres d'un hamiltonien à un corps :

$$h \varphi_{\lambda} = e_{\lambda} \varphi_{\lambda} \quad . \quad (2.1.2)$$

Le hamiltonien h peut être par exemple un hamiltonien de Nilsson^[1], ou un hamiltonien résultant d'un calcul microscopique. Les orbites λ peuvent être développées sur une base complète d'états j connus :

$$|\lambda\rangle = \sum_j d_j^{\lambda} |j\rangle \quad . \quad (2.1.3)$$

Les fonctions d'onde sur lesquelles nous allons développer les orbites seront celles du modèle des couches avec les fonctions d'onde d'un oscillateur harmonique pour la partie radiale :

$$\varphi_{n\ell j m \tau} = u_{n\ell}(r) \sum_{m_{\ell}, \sigma} \begin{bmatrix} \ell & 1/2 & j \\ m_{\ell} & \sigma & m \end{bmatrix} Y_{\ell m_{\ell}}(\Omega) X_{\sigma} X_{\tau} \quad , \quad (2.1.4)$$

$u_{n\ell}$ sont les fonctions radiales d'un oscillateur harmonique. $\begin{bmatrix} \ell & 1/2 & j \\ m_{\ell} & \sigma & m \end{bmatrix}$ sont les coefficients Clebsch-Gordon, dont la définition est donnée dans la ref.[2].

$Y_{\ell m}$ sont les harmoniques sphériques^[2] ;

X_{σ} , X_{τ} sont les spineurs dans l'espace de spin et d'isospin respectivement ;

n est le nombre quantique principal (ou radial) $n = 1, 2, 3, \dots$

ℓ est le moment cinétique orbital $\ell = 0, 1, 2, \dots$;

$j = \ell \pm 1/2$ est le moment cinétique total ;

τ est un indice d'isospin, qui distingue un proton d'un neutron.

Nous ne considérerons que les déformations du champ statique ayant la symétrie axiale, c'est-à-dire telle que le hamiltonien à un corps commute avec la composante J_z du moment cinétique sur l'axe z . Cela limite le développement (2.1.3) de chaque orbite à des états avec la même valeur de m

$$\varphi_{\lambda} = \sum_j d_j^{\lambda} \varphi_{jm_{\lambda}\tau_{\lambda}} \quad , \quad (2.1.5)$$

(l'indice j désigne ici l'ensemble de trois nombres quantiques : n , ℓ et j).

Les m_{λ} sont les valeurs propres de J_z .

Plus loin, nous allons utiliser la symétrie par renversement du temps. Soit κ l'opérateur du renversement du temps^[2]. Les états renversés sont définis comme

$$\varphi_{\tilde{\alpha}} = \kappa \varphi_{\alpha} \quad . \quad (2.1.6)$$

Avec notre choix de base (2.1.4), avec les coefficients réels $d_{n\ell jm}^{\alpha}$ et avec la convention de phase de Condon et Shortley, l'orbite renversée du temps est :

$$\varphi_{\tilde{\alpha}} = \sum_{n\ell jm} d_{n\ell jm}^{\alpha} (-)^{\ell+j-m} \varphi_{n\ell j-m} \quad . \quad (2.1.7)$$

2. Les propriétés de symétrie de l'état fondamental $|\Phi_0\rangle$

Nous étudions les noyaux légers, où la force coulombienne ne change que peu les fonctions d'onde des orbites. La symétrie par échange proton-neutron est bien conservée. Pour un noyau pair-pair avec $N=Z$ il existe toujours une solution $|\Phi_0\rangle$ dans le cadre du modèle de particules indépendantes, où les protons et les neutrons occupent les mêmes orbites. La fonction d'onde $|\Phi_0\rangle$

a donc l'isospin nul :

$$\vec{T} |\Phi_0\rangle = 0 \quad . \quad (2.2.1)$$

Cette fonction d'onde décrit un état avec l'énergie la plus basse. L'analyse des données expérimentales suggère que les fonctions d'onde du fondamental des noyaux pair-pairs ont la symétrie par renversement du temps. Le hamiltonien à un corps (2.1.2) doit donc commuter avec l'opérateur du renversement du temps. Cela signifie, que pour chaque orbite φ_λ occupée, l'orbite $\varphi_{\tilde{\lambda}}$ (2.1.7) est aussi occupée, et elle a la même énergie.

Dans les noyaux pair-pairs avec $N = Z$, les orbites λ seront quatre fois dégénérées. Nous allons placer un proton et un neutron dans chaque orbite φ_λ et dans l'orbite renversée $\varphi_{\tilde{\lambda}}$. Les configurations de tels états fondamentaux sont schématisées sur la Figure 2.1.

En général, le hamiltonien (2.1.2) ne sera pas invariant par rotation. Les fonctions d'onde $|\Phi_0\rangle$ ne seront pas des états propres du moment cinétique. Nous allons étudier les déformations axiales qui sont représentées par les fonctions d'onde, qui sont les états propres de J_z :

$$J_z |\Phi_0\rangle = M |\Phi_0\rangle \quad M = \sum_{\lambda=1}^4 m_\lambda \quad . \quad (2.2.2)$$

Dans le cas où $j_z \varphi_\lambda = m_\lambda \varphi_\lambda$, l'orbite $\varphi_{\tilde{\lambda}}$ a $j_z \varphi_{\tilde{\lambda}} = -m_\lambda \varphi_{\tilde{\lambda}}$ et $M = 0$. Le nombre quantique magnétique total de la fonction d'onde $|\Phi_0\rangle$ est égal à zéro.

3. Les configurations à deux particules deux trous sur la base déformée

Nous allons étudier les noyaux pair-pairs avec $N = Z$, dans la région $^{20}\text{Ne} - ^{36}\text{Ar}$. Nous allons utiliser la description des noyaux où les couches fermées 1s et 1p forment un coeur inerte de ^{16}O et où les A-16 nucléons de valence sont placés dans les orbites φ_λ qui ont des composantes sur les états $1d_{5/2}$, $2s_{1/2}$ et $1d_{3/2}$ de la couche 2s-1d (Figure 2.2). Le coeur inerte de ^{16}O produit un champ sphérique et toute la déformation provient des nucléons de valence.

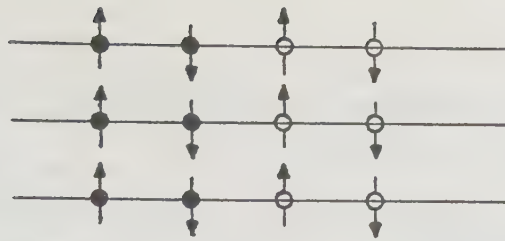


Figure 2.1 - La dégénérescence des orbitales des noyaux pair-pairs avec $N=Z$

- les protons
- les neutrons
- ↑ f_λ
- ↓ $f_{\tilde{\lambda}}$

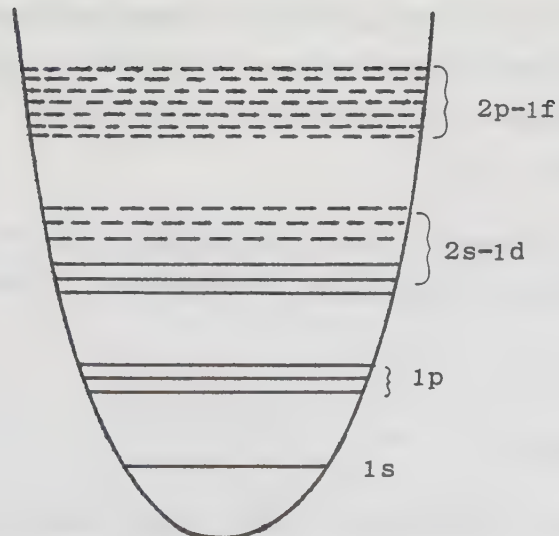


Figure 2.2 - L'état fondamental d'un noyau appartenant à la couche 2s-1d . Les lignes pleines représentent les orbitales occupées (les orbitales des trous) et les lignes en pointillé les orbitales vides (les orbitales des particules).

Le mélange des configurations à deux particules et deux trous (2p-2t) sera limité aux configurations de la couche 2s-1d .

Nous voudrions améliorer la fonction d'onde (2.1.1) en lui ajoutant les configurations à deux particules et deux trous (2p-2t). Cela nous mène à considérer la fonction d'onde de la forme :

$$|\psi\rangle = a_0 |\Phi_0\rangle + \sum_{i>j} \sum_{\alpha>\beta} c(ij, \alpha\beta) b_i^+ b_j^+ b_\beta b_\alpha |\Phi_0\rangle \quad . \quad (2.3.1)$$

Les orbites $i, j, \dots$ sont les orbites de particule (orbites vides) et les orbites $\alpha, \beta, \dots$ sont les orbites de trou (orbites occupées). Cela est montré sur la Figure 2.3 .

Une configuration à deux particules deux trous construite sur un état de particules indépendantes $|\Phi_0\rangle$ est montrée sur la Figure 2.4 .

Puisque les orbites des protons et des neutrons sont les mêmes, il faut coupler l'isospin. L'isospin total de l'état $|\Phi_0\rangle$ doit être égal à zéro et il y a deux sortes de configurations à deux particules deux trous, à savoir celles où les paires de particules et les paires de trous ont un isospin égal à $T=0$ ou 1 . L'isospin de chaque paire est ensuite couplé à l'isospin total égal à zéro (Figure 2.5).

Notons que la symétrie axiale impose une règle de sélection sur le nombre quantique magnétique total d'une configuration à deux particules et deux trous :

$$M_{(2p-2t)} = m_i + m_j - m_\alpha - m_\beta = 0 \quad . \quad (2.3.2)$$

Le couplage des isospins a été effectué de la façon habituelle : une paire de nucléons avec un isospin (T, M_T) est créée par l'opérateur :

$$B_{T, M_T}^+(i, j) = \varepsilon(i, j) \sum_{\tau_1, \tau_2} \begin{bmatrix} 1/2 & 1/2 & T \\ \tau_1 & \tau_2 & M_T \end{bmatrix} b_{i, \tau_1}^+ b_{j, \tau_2}^+ \quad , \quad (2.3.3)$$

les indices i et j désignent tous les nombres quantiques des orbites, sauf le nombre quantique d'isospin. La paire de nucléons (2.3.3) est normalisée avec un choix $\varepsilon(i, j)$

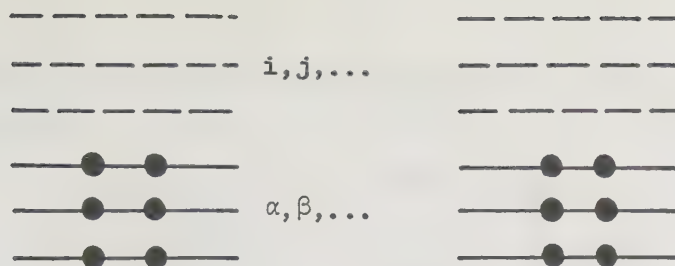


Figure 2.3 - Les orbites occupées et les orbites vides
d'un noyau pair-pair avec $N=Z$ représenté
par l'état $|\Phi_0\rangle$

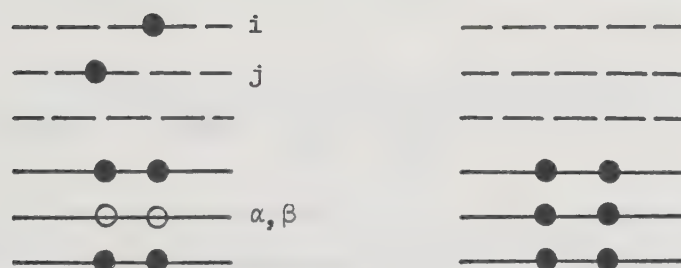


Figure 2.4 - Une configuration à deux particules et deux
trous. Les cercles blancs représentent les trous.

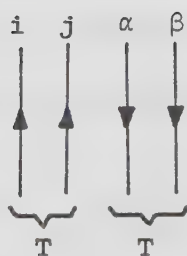


Figure 2.5 - Représentation graphique de la configuration
à 2p-2t de la Figure 2.4 .

$$\begin{aligned}
 \varepsilon(i, j) &= 1 \quad \text{pour } i \neq j \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \quad \text{pour } i = j \text{ et } T=0 \\
 &= 0 \quad \text{pour } i = j \text{ et } T=1
 \end{aligned} \tag{2.3.4}$$

et on a :

$$B_{T, M_T}^+(i, j) = (-)^T B_{T, M_T}^+(j, i) \quad . \tag{2.3.5}$$

Une configuration à deux particules et deux trous couplée et normalisée est construite ainsi :

$$|ij, \alpha\beta, T\rangle = \varepsilon(i j) \varepsilon(\alpha \beta) \frac{1}{\sqrt{2T+1}} \sum_{M_T} B_{T, M_T}^+(i j) B_{T, M_T}(\alpha \beta) |\Phi_0\rangle \quad . \tag{2.3.6}$$

L'indice T désigne l'isospin 0 ou 1 pour chacune des paires de nucléons. L'isospin total de la configuration à deux particules deux trous (2.3.6) est zéro. Le développement de l'état (2.3.1) sur la base couplée et normalisée (2.3.6) est le suivant

$$|\psi\rangle = a_0 |\Phi_0\rangle + \sum_{i \geq j} \sum_{\alpha \geq \beta} C(i, j; \alpha, \beta; T) |ij, \alpha\beta, T\rangle \quad . \tag{2.3.7}$$

La dimension de l'espace des configurations à deux particules et deux trous peut être considérablement réduite du fait que la fonction d'onde $|\Phi_0\rangle$ est invariante par renversement du temps.

La configuration à deux particules deux trous (2.3.6) renversée est

$$|\tilde{i}\tilde{j}, \tilde{\alpha}\tilde{\beta}, T\rangle = \varepsilon(\tilde{i} \tilde{j}) \varepsilon(\tilde{\alpha} \tilde{\beta}) \frac{1}{\sqrt{2T+1}} \sum_{M_T} B_{T, M_T}^+(\tilde{i} \tilde{j}) B_{T, M_T}(\tilde{\alpha} \tilde{\beta}) |\Phi_0\rangle \quad . \tag{2.3.8}$$

Pour obtenir des configurations ayant la même invariance par rapport au renversement du temps que la fonction d'onde $|\Phi_0\rangle$, les configurations dans le développement (2.3.7) peuvent être remplacées par les configurations

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(|ij, \alpha\beta, T\rangle + |\tilde{i}\tilde{j}, \tilde{\alpha}\tilde{\beta}, T\rangle \right) \tag{2.3.9}$$

$$\text{et} \quad |i\tilde{i}, \alpha\tilde{\alpha}, T\rangle \quad . \tag{2.3.10}$$

Les états (2.3.10) sont déjà invariants par renversement du temps. Une interaction d'appariement du type

$$\langle a\tilde{a}|v|b\tilde{b}\rangle_{T=1} = v_1 \quad (2.3.11)$$

produit les configurations $|i\tilde{i}, a\tilde{a}, 1\rangle$ et les configurations $|i\tilde{i}, a\tilde{a}, 0\rangle$ sont produites par une interaction d'appariement du type

$$\langle a\tilde{a}|v|b\tilde{b}\rangle_{T=0} = v_0 \quad (2.3.11)$$

qui a été étudiée dans la référence [3] .

CHAPITRE 3

LE TRAITEMENT DES CORRELATIONS A DEUX PARTICULES ET DEUX TROUS

1. La définition de l'interaction résiduelle

Le hamiltonien nucléaire d'un système à A nucléons est défini comme :

$$H = T + V = \sum_{\lambda, \mu} \langle \lambda | t | \mu \rangle b_{\lambda}^{\dagger} b_{\mu} + \frac{1}{4} \sum_{\lambda \mu \rho \delta} \langle \lambda \mu | v | \rho \delta \rangle b_{\lambda}^{\dagger} b_{\mu}^{\dagger} b_{\delta} b_{\rho} \quad (3.1.1)$$

En utilisant le théorème de Wick nous pouvons écrire le hamiltonien sous la forme :

$$H = E_0 + \sum_{\lambda \mu} e_{\lambda \mu} : b_{\lambda}^{\dagger} b_{\mu} : + \frac{1}{4} \sum_{\lambda \mu \rho \delta} \langle \lambda \mu | v | \rho \delta \rangle : b_{\lambda}^{\dagger} b_{\mu}^{\dagger} b_{\delta} b_{\rho} : \quad (3.1.2)$$

Les contractions sont définies par rapport à l'état $|\Phi_0\rangle$. E_0 est la somme de tous les termes complètement contractés :

$$E_0 = \langle \Phi_0 | H | \Phi_0 \rangle \quad (3.1.3)$$

Le deuxième terme représente le hamiltonien moyen à un corps :

$$H_0 = \sum_{\lambda \mu} e_{\lambda \mu} : b_{\lambda}^{\dagger} b_{\mu} : \quad (3.1.4)$$

Les $e_{\lambda \mu}$ sont définies ainsi :

$$e_{\lambda \mu} = \langle \lambda | K | \mu \rangle + \sum_{\alpha=1}^A \langle \lambda \alpha | v | \mu \alpha \rangle \quad (3.1.5)$$

Lorsque les états λ, μ résultent d'un calcul de Hartree-Fock on a $e_{\lambda \mu} = e_{\lambda} \delta_{\lambda \mu}$. Dans nos calculs K est l'opérateur qui représente le champ sphérique de ^{16}O et qui est défini par ses éléments de matrice :

$$\langle j m \tau | K | j' m' \tau \rangle = \epsilon_j \delta_{j j'} \delta_{m m'} \quad (3.1.6)$$

Le troisième terme représente l'interaction résiduelle :

$$v = \frac{1}{4} \sum_{\lambda\mu\rho\delta} \langle \lambda\mu | v | \rho\delta \rangle : b_{\lambda}^{\dagger} b_{\mu}^{\dagger} b_{\delta} b_{\rho} : \quad (3.1.7)$$

Nous avons défini l'espace des configurations à deux particules et deux trous. Il faut calculer les éléments de matrice de l'interaction résiduelle v . Après avoir calculé les éléments de matrice, on pourrait diagonaliser simplement la matrice du hamiltonien H dans l'espace composé par l'état $|\Phi_0\rangle$ et les configurations à deux particules et deux trous, afin d'obtenir les composantes a_0 et $C(ij, \alpha\beta, T)$ de la fonction d'onde (2.3.7). On peut critiquer cette méthode pour deux raisons :

a) Les excitations à 2p-2t qui abaissent l'état fondamental, abaissent également les états 2p-2t de la même quantité. Cela ne résulterait pas de la diagonalisation simple.

b) Il y aurait des effets parasites, car $|\Phi_0\rangle$ n'est pas un état propre de l'opérateur du moment cinétique $\vec{J}^2$.

Les effets parasites seront discutés dans le chapitre 4.

Dans les paragraphes suivants, nous allons exposer et comparer les deux théories des perturbations : la théorie de Rayleigh-Schrödinger et la théorie de Brillouin-Wigner. Dans le problème à N corps, la théorie des perturbations de Rayleigh-Schrödinger s'exprime par la méthode des diagrammes connexes^[4]. Nous allons montrer, que la resommation d'une sous-série des diagrammes connexes en échelle se ramène à la diagonalisation du hamiltonien dans l'espace des configurations, sans avoir inclus l'état fondamental. Nous allons aussi montrer, que la diagonalisation simple (celle où l'on diagonalise simultanément l'état fondamental avec les configurations appartenant à un espace) correspond à la resommation d'une série de type Brillouin-Wigner.

2. La théorie des perturbations de Rayleigh-Schrödinger^[4]

Dans ce chapitre nous allons désigner chaque configuration à deux particules et deux trous $|kj, \alpha\beta, T\rangle$ par un indice I et les éléments de matrice de l'interaction résiduelle entre ces configurations par V_{IJ} . Par V_{I0}

nous désignerons les éléments de matrice de l'interaction résiduelle, qui couplent la configuration $|\Phi_0\rangle$ aux configurations $|I\rangle$. Les vecteurs $|I\rangle$ sont des vecteurs propres du hamiltonien moyen à un corps H_0 :

$$H_0 |\Phi_0\rangle = 0 \quad (3.2.1)$$

$$H_0 |I\rangle = (e_k + e_j - e_\alpha - e_\beta) |I\rangle = E_I |I\rangle .$$

Le gain en énergie au premier ordre est inclus dans le terme $E_0 = \langle \Phi_0 | H | \Phi_0 \rangle$ du hamiltonien (3.1.2). Le gain en énergie au deuxième ordre de perturbation est le suivant :

$$\Delta E = - \sum_I \frac{|V_{IO}|^2}{E_I} . \quad (3.2.2)$$

La fonction d'onde perturbée au premier ordre est

$$|\psi\rangle = |\Phi_0\rangle - \sum_I \frac{V_{OI}}{E_I} |I\rangle . \quad (3.2.3)$$

3. La perturbation de Brillouin-Wigner

Nous allons démontrer, que la diagonalisation d'une matrice

$$H = \left(\begin{array}{c|ccc} 0 & & \dots & V_{OI} & \dots \\ \hline \vdots & & & & \\ V_{JO} & & E_I & & \\ \vdots & & & & \\ \vdots & & & & \end{array} \right) , \quad (3.3.1)$$

où tous les éléments de matrice d'interaction V_{IJ} sont mis à zéro sauf les éléments de matrice qui couplent l'état fondamental $|\Phi_0\rangle$ aux configurations $|I\rangle$ et qui sont mis à la première ligne et à la première colonne, correspond au deuxième ordre de perturbations de type Brillouin-Wigner^[4].

L'équation séculaire

$$\left(\begin{array}{c|ccc} 0 & & \dots & V_{OI} & \dots \\ \hline \vdots & & & & \\ V_{JO} & & E_I & & \\ \vdots & & & & \\ \vdots & & & & \end{array} \right) \begin{pmatrix} Y_O^N \\ \vdots \\ Y_I^N \\ \vdots \end{pmatrix} = \Delta E \begin{pmatrix} Y_O^N \\ \vdots \\ Y_I^N \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (3.3.2)$$

donne les relations suivantes :

$$\sum_I v_{OI} y_I^N = \Delta E y_O^N \quad (3.3.3)$$

$$v_{IO} y_O^N = (\Delta E - E_I) y_I^N, \quad (3.3.4)$$

d'où

$$\frac{v_{IO}}{\Delta E - E_I} y_O^N = y_I^N. \quad (3.3.5)$$

En multipliant cette expression par v_{IO} et en resommant toute l'expression en I :

$$\sum_I \frac{|v_{IO}|^2}{\Delta E - E_I} y_O^N = \sum_I y_I^N v_{IO} = \Delta E y_O^N. \quad (3.3.6)$$

Cela donne

$$\Delta E = \sum_I \frac{|v_{IO}|^2}{\Delta E - E_I} \quad (3.3.7)$$

qui est l'expression du deuxième ordre de la théorie des perturbations du type Brillouin-Wigner.

4. La méthode de resommation des diagrammes connexes

$k_1, k_2, \dots$ seront les indices des particules ;

$\alpha_1, \alpha_2, \dots$ seront les indices des trous.

Nous définissons les opérateurs

$$A_I(t) = A_{k_1 k_2 \alpha_1 \alpha_2}(t) = a_{k_1}^+(t) a_{k_2}^+(t) a_{\alpha_1}(t) a_{\alpha_2}(t); \quad (3.4.1)$$

les $a(t)$ et $a^+(t)$ sont les opérateurs dans la représentation de Heisenberg

$$a_k(t) = e^{iHt} a_k e^{-iHt}. \quad (3.4.2)$$

La fonction de Green à deux particules et deux trous est définie ainsi :

$$G_{IJ}(t_2 - t_1) = -i \langle \psi | T(A_I(t_2) A_J(t_1)) | \psi \rangle , \quad (3.4.3)$$

$|\psi\rangle$ représente l'état fondamental du système. Nous allons désigner les états excités du système par $|N\rangle$:

$$\begin{aligned} H |\psi\rangle &= E |\psi\rangle \\ H |N\rangle &= E_N |N\rangle . \end{aligned} \quad (3.4.4)$$

L'insertion de la fermeture entre les opérateurs $A_I(t_2)$ et $A_J(t_1)$ donne l'expression suivante :

$$\begin{aligned} G_{IJ}(t_2 - t_1) &= -i \theta(t_2 - t_1) \sum_N \langle \psi | A_I | N \rangle \langle N | A_J | \psi \rangle e^{-i(E_N - E)(t_2 - t_1)} \\ &\quad -i \theta(t_1 - t_2) \sum_N \langle \psi | A_J | N \rangle \langle N | A_I | \psi \rangle e^{i(E_N - E)(t_2 - t_1)} \end{aligned} \quad (3.4.5)$$

θ désigne la fonction Heaviside .

Nous ne considérerons que la partie retardée du propagateur (3.4.5), c'est-à-dire :

$$G_{IJ}^R(t_2 - t_1) = -i \theta(t_2 - t_1) \sum_N \langle \psi | A_I | N \rangle \langle N | A_J | \psi \rangle e^{-i(E_N - E)(t_2 - t_1)} . \quad (3.4.6)$$

(Nous omettrons dans la suite l'indice R).

Nous allons poser $t_1 = 0$ et $E = 0$ et effectuer la transformation de Fourier. Les E_N représenteront les énergies des états excités par rapport au fondamental

$$G_{IJ}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} G_{IJ}(t) e^{i\omega t} dt \quad (3.4.7)$$

$$G_{IJ}(\omega) = \sum_N \frac{\langle \psi | A_I | N \rangle \langle N | A_J | \psi \rangle}{\omega - E_N + i\varepsilon} . \quad (3.4.8)$$

En posant $H = H_0$, on obtient le propagateur retardé non perturbé d'une configuration à deux particules et deux trous :

$$G_{IJ}^{(0)}(\omega) = \frac{\delta_{IJ}}{\omega - E_I + i\varepsilon} , \quad (3.4.9)$$

où E_I désigne les énergies d'excitation à deux particules et deux trous du hamiltonien non perturbé H_0 . Les pôles de la fonction de Green (3.3.7) donnent les excitations E_N du système. Nous allons calculer les pôles de la fonction de Green (3.3.7) en résolvant l'équation de Dyson pour la sous-série des diagrammes en échelle (Figure 3.1). Une ligne $\uparrow$ représente le propagateur non perturbé d'une particule et une ligne $\downarrow$ représente le propagateur non perturbé d'un trou. L'ensemble de quatre lignes représente le propagateur retardé non perturbé d'une configuration à deux particules et deux trous. Chaque vertex V_{IJ} comprend l'interaction entre les particules, entre les trous et l'interaction entre les particules et les trous. Cela est illustré sur la Figure 3.2.

L'équation de Dyson correspondante à la sous-série de diagrammes en échelle de la Figure 3.2 est la suivante :

$$G_{IJ}(\omega) = \frac{\delta_{IJ}}{\omega - E_I + i\varepsilon} + \frac{1}{\omega - E_I + i\varepsilon} \sum_L V_{IL} G_{LJ}(\omega) \quad ; \quad (3.4.10)$$

cette équation peut être écrite sous la forme :

$$\sum_L \left[(E_I - \omega) \delta_{IL} + V_{IL} \right] G_{LJ}(\omega) = -\delta_{IJ} \quad . \quad (3.4.11)$$

Nous définissons une matrice auxiliaire

$$M_{IL} = E_I \delta_{IL} + V_{IL} \quad . \quad (3.4.12)$$

L'équation de Dyson s'écrit maintenant :

$$(M_{IL} - \omega \delta_{IL}) G_{LJ}(\omega) = -\delta_{IJ} \quad . \quad (3.4.13)$$

Pour obtenir le propagateur à deux particules et deux trous, il suffit donc d'inverser la matrice M_{IL} . Il est commode de résoudre d'abord le problème aux valeurs propres

$$\sum_J M_{IJ} X_J^N = E_N X_I^N \quad . \quad (3.4.14)$$

La matrice inverse $(M - \omega \mathbb{1})^{-1}$ peut s'exprimer par les vecteurs propres X^N et par les valeurs propres E_N de la matrice M :

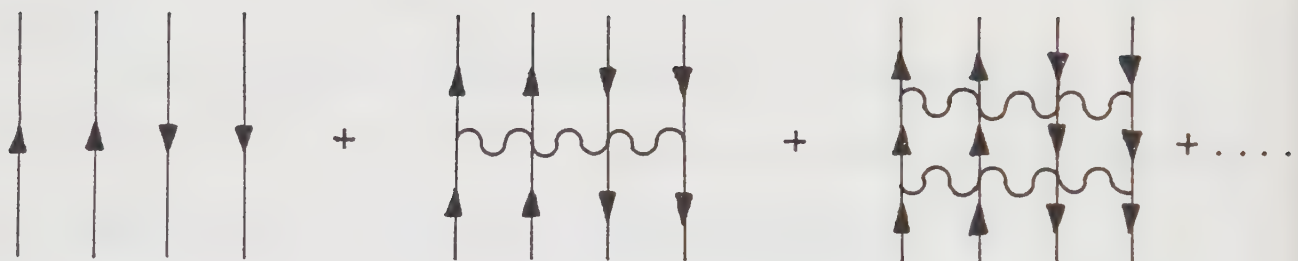
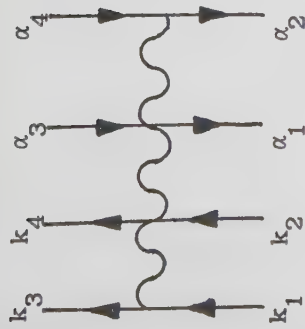
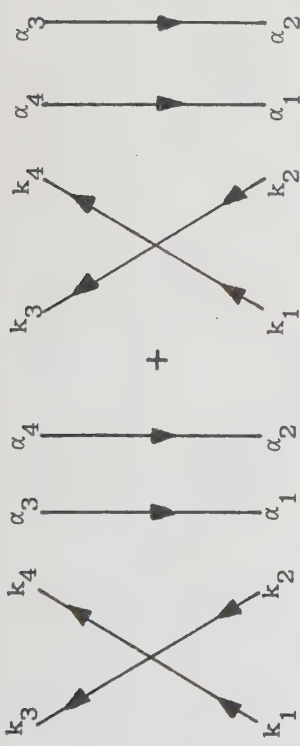


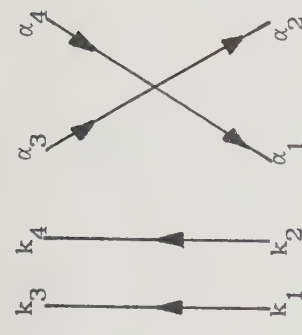
Figure 3.1



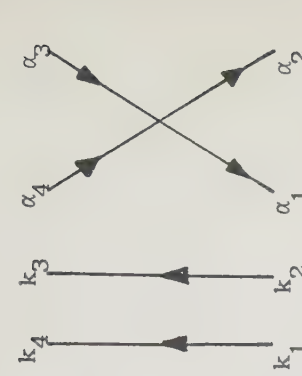
=



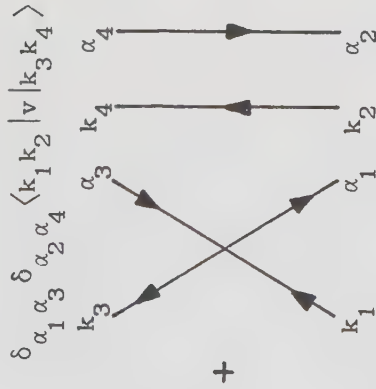
+



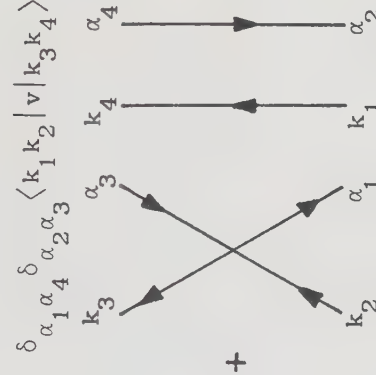
+



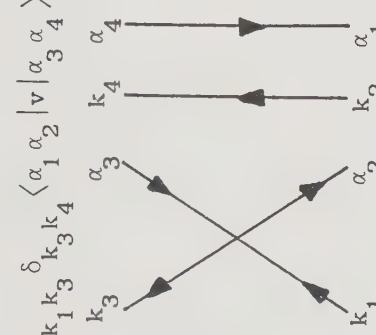
+



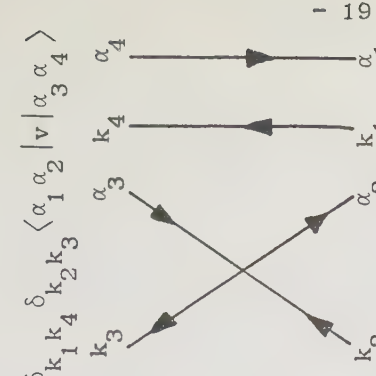
+



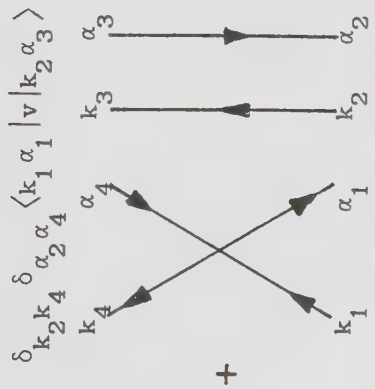
+



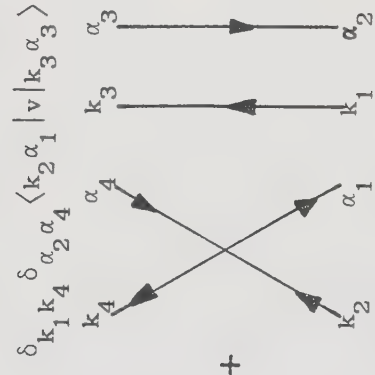
+



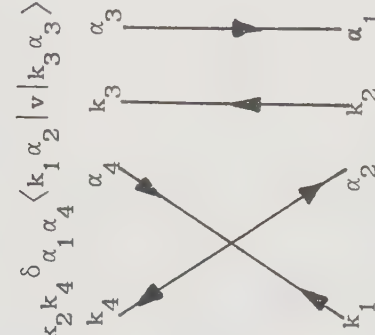
+



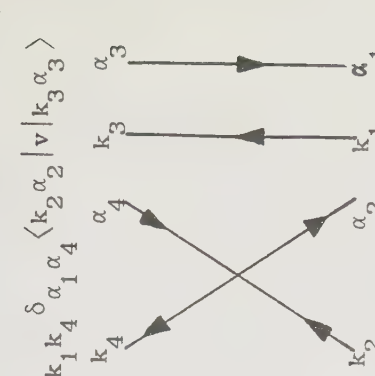
+



+



+



+

$\delta_{k_2 k_3} \delta_{\alpha_2 \alpha_3} \langle k_1 \alpha_1 | v | k_4 \alpha_4 \rangle$

$\delta_{k_1 k_3} \delta_{\alpha_2 \alpha_3} \langle k_2 \alpha_1 | v | k_4 \alpha_4 \rangle$

$\delta_{k_2 k_3} \delta_{\alpha_1 \alpha_3} \langle k_1 \alpha_2 | v | k_4 \alpha_4 \rangle$

$\delta_{k_1 k_3} \delta_{\alpha_2 \alpha_3} \langle k_2 \alpha_1 | v | k_4 \alpha_4 \rangle$

$\delta_{k_1 k_3} \delta_{\alpha_1 \alpha_3} \langle k_2 \alpha_2 | v | k_4 \alpha_4 \rangle$

1 1 1 1

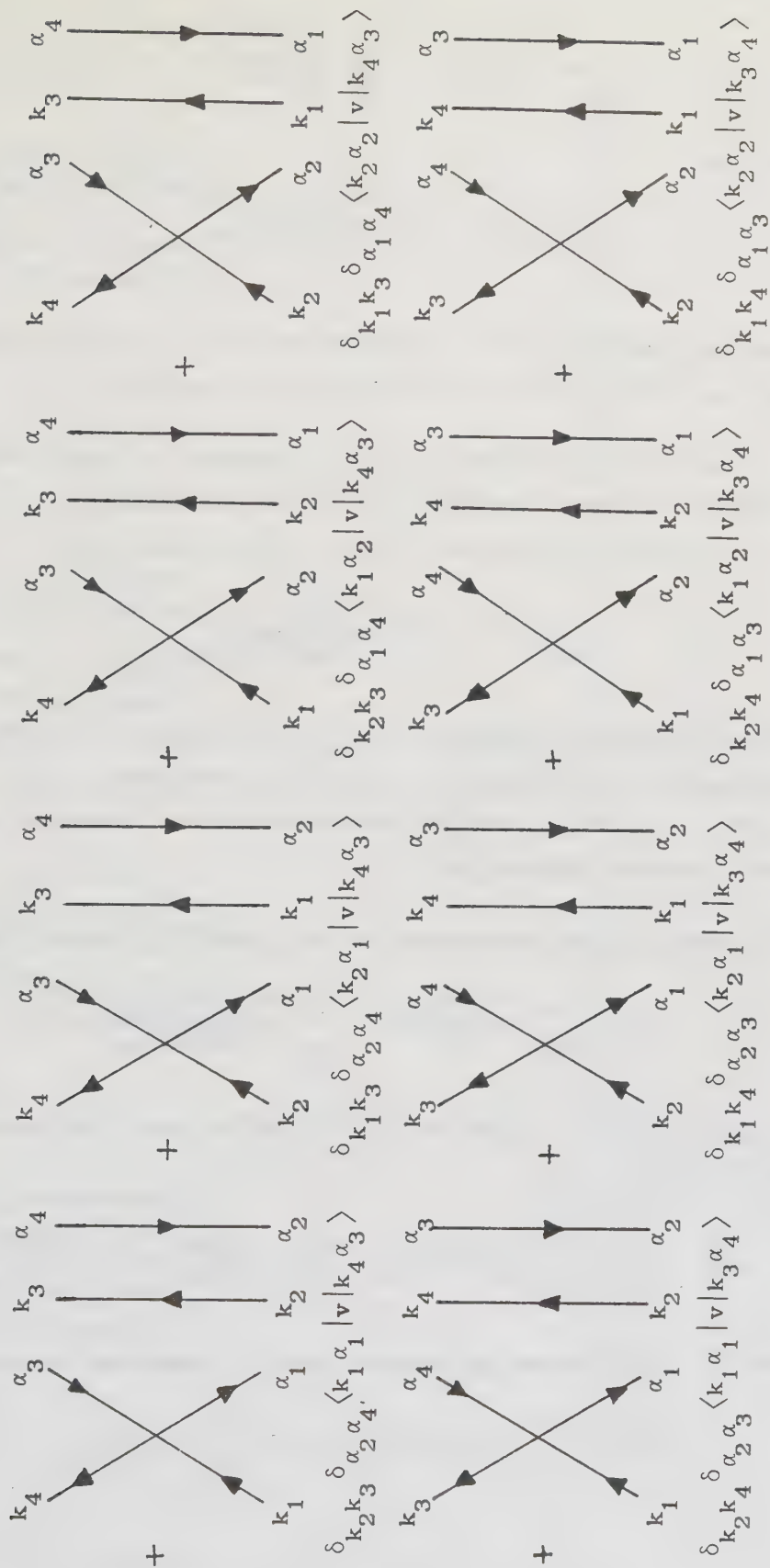


Figure 3.2 - La décomposition d'un vertex. Les éléments de matrice sont antisymétrisés, c'est-à-dire qu'ils contiennent le terme direct et le terme d'échange.

$$(M - \omega \mathbb{1})_{IL}^{-1} = \sum_N \frac{x_I^N x_L^N}{E_N - \omega} \quad . \quad (3.4.15)$$

Par conséquent

$$G_{LJ}(\omega) = \sum_N \frac{x_L^N x_J^N}{\omega - E_N + i\varepsilon} \quad , \quad (3.4.16)$$

x_I^N désigne la composante N du vecteur propre X^N sur la configuration I de la base qui diagonalise le hamiltonien non perturbé H_0 .

Les valeurs propres E_N de la matrice M sont identiques aux pôles de la fonction de Green cherchée. Or, elles représentent les énergies des états excités par rapport à l'énergie E de l'état fondamental $|\psi\rangle$:

$$G_{LJ}(\omega) = \sum_N \frac{x_L^N x_J^N}{\omega - E_N + i\varepsilon} \quad . \quad (3.4.17)$$

Nous allons trouver la dépression ΔE de l'énergie du fondamental perturbé $|\psi\rangle$ par rapport à l'énergie E_0 de l'état fondamental $|\Phi_0\rangle$ du hamiltonien non perturbé H_0 avec l'aide du développement de l'énergie du fondamental en diagrammes connexes (Figure 3.3).

La sommation des diagrammes de la figure 3.3 donne l'expression suivante :

$$\Delta E = \sum_I \frac{V_{OI} V_{IO}}{-E_I} + \sum_{I,J} \frac{V_{OI} V_{IJ} V_{JO}}{(-E_I)(-E_J)} + \dots \quad . \quad (3.4.18)$$

On peut récrire ΔE à l'aide des fonctions de Green non perturbées (3.4.9) en posant $\omega = 0$:

$$\Delta E = \sum_I V_{OI} G_{II}^{(0)}(0) V_{IO} + \sum_{I,J} V_{OI} G_{II}^{(0)}(0) V_{IJ} G_{JJ}^{(0)} V_{JO} + \dots \quad , \quad (3.4.19)$$

l'équation (3.4.10) permet de sommer toute la série en fonction de $G_{IJ}(\omega)$:

$$\Delta E = \sum_{I,J} V_{OI} G_{IJ}^{(0)} V_{JO} = \sum_I D_I V_{OI} \quad (3.4.20)$$

où

$$D_I = \sum_J G_{IJ}^{(0)} V_{JO} \quad . \quad (3.4.21)$$

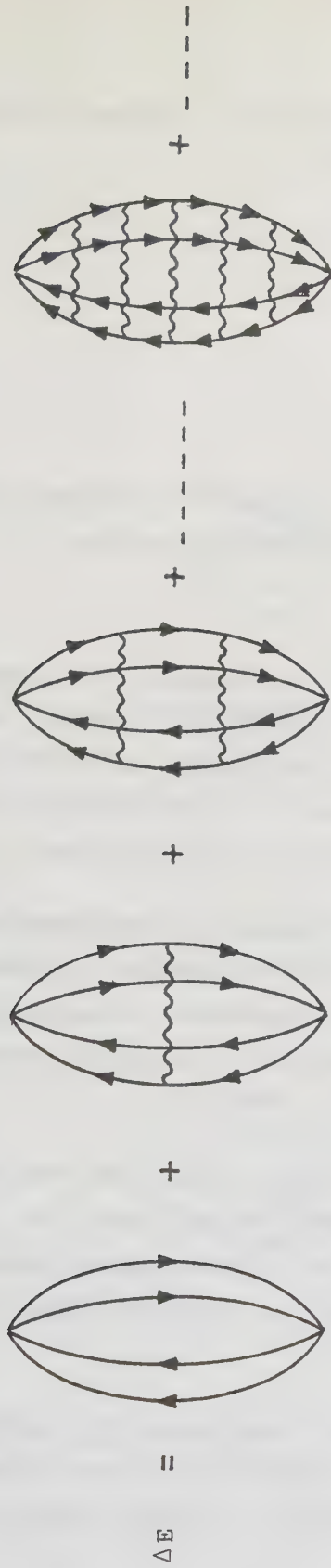


Figure 3.3

Le développement de l'énergie du fondamental en diagrammes connexes. La décomposition des vertex a été montrée sur la Figure 3.2 .

Si on insère l'expression (3.4.17) dans (3.4.20), on obtient la formule suivante pour la dépression de l'état fondamental :

$$\Delta E = - \sum_N \frac{|v_{ON}|^2}{E_N} , \quad (3.4.22)$$

où

$$v_{ON} = \sum_I x_I^N v_{IO} . \quad (3.4.23)$$

Dans les calculs, il faut faire attention à l'apparition éventuelle des valeurs propres $E_N < 0$, qui indiquent l'instabilité du système.

Pour résumer :

On somme les diagrammes connexes de la Figure 3.3 en diagonalisant les configurations à 2p-2t, sans inclure la configuration Op-Ot. Les valeurs propres E_N sont alors égales aux énergies d'excitation des états à 2p-2t par rapport au vrai fondamental. L'énergie perturbée du fondamental est obtenue en couplant les vecteurs propres au fondamental selon l'équation (3.4.22).

On pourrait s'étonner, à première vue, que la configuration à Op-Ot ne figure pas parmi les configurations que l'on diagonalise. On peut en comprendre la raison de la façon suivante. L'énergie du fondamental est abaissée par le mélange des configurations à 2p-2t par exemple par le processus correspondant au diagramme A de la Figure 3.4.

Mais les états à deux particules et deux trous sont également abaissés par le même processus montré dans le diagramme B de la Figure 3.4. Seulement, ce processus correspond à un diagramme non lié. Or nous avons inclus tous les diagrammes non liés en utilisant les énergies E_I non perturbées pour les propagateurs dans les diagrammes.

Il est évident que si les énergies d'excitation E_N des états à 2p-2t sont trop petites, c'est-à-dire si les états à deux particules et deux trous sont presque dégénérés avec le fondamental, la théorie des perturbations que nous utilisons ne convergera plus.

Il vaut mieux dans ce cas inclure le fondamental parmi les configurations à diagonaliser et nous appellerons cette méthode, la diagonalisation simple décrite au paragraphe 5. On ne somme plus dans ce cas les diagrammes connexes.

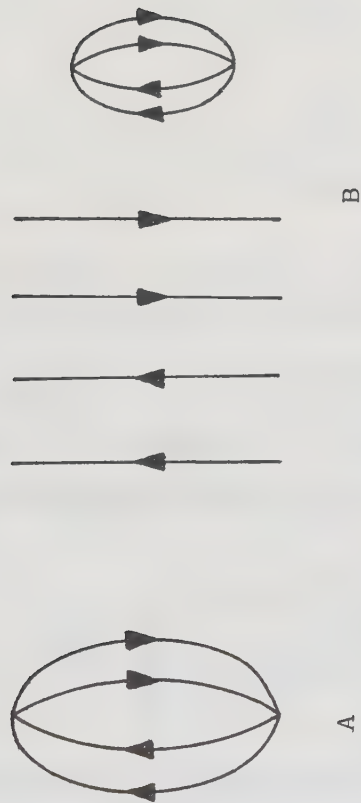


Figure 3.4 - Le diagramme A est un processus qui abaisse l'énergie du fondamental. Le diagramme B est un processus non-lié qui abaisse l'énergie d'une configuration à $2p-2t$ de la même quantité.

5. La diagonalisation simple

Nous appelons "diagonalisation simple" la diagonalisation du hamiltonien H dans un espace qui comprend l'état fondamental $|\Phi_0\rangle$ et un espace des configurations à deux particules et deux trous.

Il est commode de poser $E_0 = 0$.

La matrice à diagonaliser est la suivante :

$$H = \left(\begin{array}{c|ccc} 0 & \dots & V_{OI} & \dots \\ \hline \vdots & & & \\ V_{JO} & & M_{IJ} & \\ \vdots & & & \end{array} \right), \quad (3.5.1)$$

M est la matrice définie dans (3.4.12).

Calculons la dépression de l'énergie ΔE par la diagonalisation exacte de la matrice (3.5.1) et comparons le résultat avec celui obtenu par la resommation des diagrammes connexes.

Nous allons d'abord rendre la sous-matrice M diagonale par une transformation unitaire. La matrice de transformation sera la suivante :

$$S_{NI} = \left(\begin{array}{c|cccc} 1 & 0 & 0 & \dots & \dots \\ \hline 0 & & & & \\ 0 & & X_I^N & & \\ \vdots & & & & \end{array} \right), \quad (3.5.2)$$

X_I^N sont les vecteurs propres de la matrice M . La transformation SHS^{-1} rend la sous-matrice M diagonale et effectue la transformation linéaire (3.4.23) sur la ligne $\dots V_{OI} \dots$ et la colonne $\dots V_{JO} \dots$.

$$SHS^{-1} = \left(\begin{array}{c|ccc} 0 & \dots & V_{ON} & \dots \\ \hline \vdots & E_I & & \\ V_{NO} & & E_N & \\ \vdots & & & \end{array} \right). \quad (3.5.3)$$

La diagonalisation de la matrice SHS^{-1} mène à l'équation séculaire :

$$\begin{pmatrix} 0 & \dots & V_{ON} & \dots \\ \vdots & E_I & \vdots & \vdots \\ V_{NO} & \vdots & E_N & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Y_O^M \\ \vdots \\ Y_N^M \\ \vdots \end{pmatrix} = \Delta E \begin{pmatrix} Y_O^M \\ \vdots \\ Y_N^M \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (3.5.4)$$

Le raisonnement analogue à celui du paragraphe 3 du même chapitre nous mène à une formule de dispersion

$$\Delta E = \sum_N \frac{|V_{ON}|^2}{\Delta E - E_N} \quad (3.5.5)$$

Les racines de cette équation donnent l'énergie de l'état fondamental corrélé E_{diag} et les états excités ω_α . La solution graphique de l'équation (3.5.5) est représentée sur la Figure 3.5.

La série perturbative Brillouin-Wigner^[4] est la suivante :

$$\Delta E = \sum_I \frac{V_{OI} V_{IO}}{\Delta E - E_I} + \sum_{I,J} \frac{V_{OI} V_{IJ} V_{JO}}{(\Delta E - E_I)(\Delta E - E_J)} + \dots \quad (3.5.6)$$

On peut récrire ΔE à l'aide de la fonction de Green non perturbée (3.4.9) en posant $\omega = \Delta E$:

$$\Delta E = \sum_I V_{OI} G_{II}^{(0)}(\Delta E) V_{IO} + \sum_{I,J} V_{OI} G_{II}^{(0)}(\Delta E) V_{IJ} G_{JJ}^{(0)}(\Delta E) V_{JO} + \dots \quad (3.5.7)$$

et donc :

$$\Delta E = \sum_{I,J} V_{OI} G_{IJ}(\Delta E) V_{JO} = \sum_N \frac{|V_{ON}|^2}{\Delta E - E_N} \quad (3.5.8)$$

Ce résultat est identique à l'expression (3.5.5) obtenue avec la diagonalisation simple. La diagonalisation simple correspond donc à la resommation d'une série perturbative de type Brillouin-Wigner. Il est facile de voir (Figure 3.5) que la diagonalisation simple surestime la différence en énergie entre l'état fondamental et le premier état excité. D'un côté, elle sous-estime la dépression en énergie du fondamental. ΔE est toujours plus grand que ΔE_{diag} .

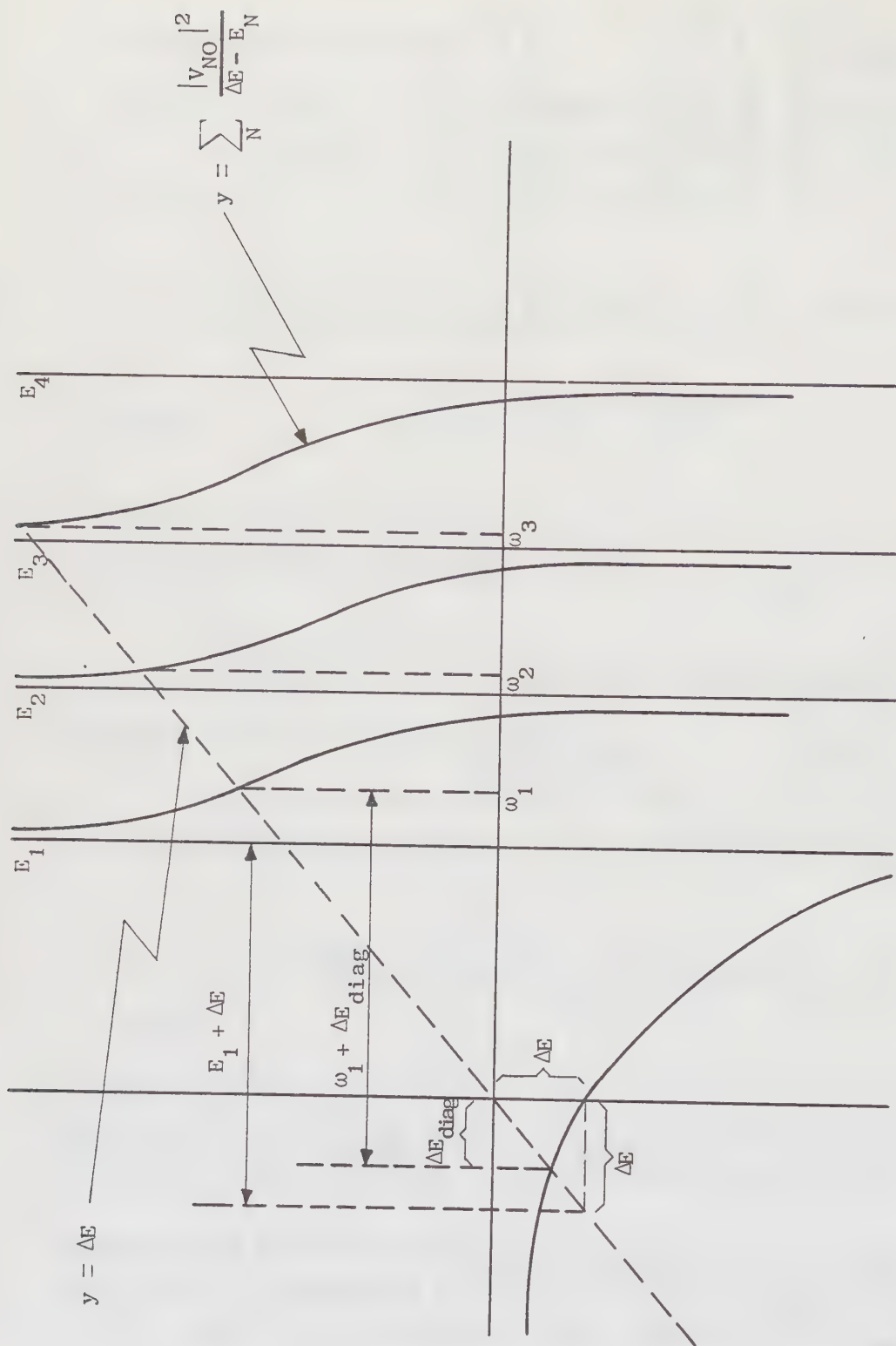


Figure 3.5 - ΔE est l'énergie de l'état corrélé calculée avec les diagrammes connexes
 ΔE_{diag} est l'énergie de l'état corrélé calculée avec la diagonalisation simple
 $E_1 \dots E_N$ sont les pôles de la fonction de Green
 $\omega_1 \dots \omega_N$ sont les énergies des états excités obtenues par la diagonalisation simple

CHAPITRE 4

LA NON-CONSERVATION DU MOMENT CINÉTIQUE ET LES EFFETS PARASITES RESULTANT

La fonction d'onde des particules indépendantes dans un champ déformé n'est pas nécessairement un état propre du carré du moment cinétique $\vec{J}^2$. D'abord nous allons considérer la projection de la fonction d'onde des particules indépendantes sur les états de bon moment cinétique. Dans le paragraphe 2 sera exposé le calcul des moments d'inertie des états déformés. Ensuite, nous exposerons les difficultés auxquelles on se heurte en traitant les corrélations à partir d'une base déformée. Une méthode pour surmonter ces difficultés sera décrite dans le paragraphe 4.

1. La non-conservation du moment cinétique

Nous allons étudier les effets qui apparaissent quand le hamiltonien moyen (3.1.4) n'est pas invariant par rotation. D'abord, si le hamiltonien H_0 n'est pas invariant par rotation, la fonction d'onde $|\Phi_0\rangle$ n'est pas nécessairement un état propre de $\vec{J}^2$. Remarquons ici que le hamiltonien total H (3.1.2) est invariant par rotation :

$$[H, \vec{J}^2] = 0 \quad (4.1.1)$$

et il existe donc un système de vecteurs propres commun pour les deux opérateurs.

La fonction d'onde d'un noyau déformé projetée sur l'état de bon moment cinétique peut s'exprimer à l'aide de l'intégrale de Hill-Wheeler^[5] :

$$|\Phi_{MK}^J\rangle = \frac{1}{a_{JK}^{1/2}} \frac{2J+1}{8\pi^2} \int d\Omega D_{MK}^{J*}(\Omega) R(\Omega) |\Phi_K\rangle \quad (4.1.2)$$

Nous allons nous limiter aux cas où la symétrie axiale est conservée et la fonction d'onde intrinsèque est l'état propre de l'opérateur J_z avec la valeur propre K . M désigne la projection du moment cinétique total $\vec{J}$ sur l'axe z du système de référence du laboratoire. K désigne la projection du moment ciné-

tique $\vec{J}$ sur l'axe z du référentiel attaché au noyau. $R(\Omega)$ est l'opérateur de rotation :

$$R(\Omega) = e^{-i\alpha J_z} e^{-i\beta J_y} e^{-i\gamma J_z}, \quad (4.1.3)$$

dont les éléments de matrice sont :

$$D_{MK}^J(\Omega) = \langle JM | R(\Omega) | JK \rangle. \quad (4.1.4)$$

Avec la symétrie axiale, les éléments de matrice (4.1.4) deviennent

$$\langle JM | e^{-i\beta J_y} | JK \rangle = d_{MK}^J(\beta), \quad (4.1.5)$$

où $d_{MK}^J(\beta)$ est la matrice de rotation réduite [2].

Les a_{JK} sont les coefficients de normalisation :

$$a_{JK} = \frac{2J+1}{8\pi^2} \int d\Omega D_{KK}^{J*}(\Omega) \langle \Phi_K | R(\Omega) | \Phi_K \rangle. \quad (4.1.6)$$

Pour $M = K$ l'équation (4.1.2) représente la projection de la fonction d'onde Φ_K sur le sous-espace du moment cinétique $\vec{J}$, l'opérateur de projection P_K^J étant défini comme :

$$P_K^J = \sum_{\alpha} |\alpha JK\rangle \langle \alpha JK| = \frac{2J+1}{8\pi^2} \int d\Omega D_{KK}^{J*}(\Omega) R(\Omega), \quad (4.1.7)$$

où α désigne un ensemble complet des nombres quantiques autres que J et K . L'opérateur P_K^J satisfait les relations

$$P_K^{J^2} = P_K^J \quad (4.1.8)$$

$$\text{et} \quad \sum_J P_K^J = 1. \quad (4.1.9)$$

La fonction intrinsèque $|\Phi_0\rangle$ d'un noyau pair-pair, $N=Z$ a $K=0$ (Chapitre 2, § 2). Nous supprimerons l'indice K , en le prenant fixe et égal à zéro. La valeur moyenne d'énergie du noyau dans l'état $|\Phi^J\rangle$ est donnée par la formule :

$$\varepsilon_J = \frac{\langle \Phi_0 | H P^J | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | P^J | \Phi_0 \rangle} = \frac{\int_0^\pi d\beta \sin\beta d_{00}^J(\beta) \langle \Phi_0 | e^{-i\beta J_y} H | \Phi_0 \rangle}{\int_0^\pi d\beta \sin\beta d_{00}^J(\beta) \langle \Phi_0 | e^{-i\beta J_y} | \Phi_0 \rangle} \quad (4.1.10)$$

Nous allons d'abord montrer que l'on trouve toujours un gain en énergie en projetant sur l'état de bon moment cinétique. La fonction d'onde de particules indépendantes peut être développée comme suit :

$$|\Phi_0\rangle = \sum_J P^J |\Phi_0\rangle = \sum_J a_J |\Phi^J\rangle, \quad (4.1.11)$$

avec la normalisation

$$\sum_J |a_J|^2 = 1 \quad (4.1.12)$$

L'énergie du fondamental peut se décomposer comme suit :

$$\langle \Phi_0 | H | \Phi_0 \rangle = E_0 = \sum_J a_J^2 \langle \Phi^J | H | \Phi^J \rangle = \sum_J |a_J|^2 \varepsilon_J \quad (4.1.13)$$

Les valeurs propres ε_J peuvent être rangées ainsi :

$$\varepsilon_0 \leq \varepsilon_1 \leq \varepsilon_2 \leq \dots \leq \varepsilon_{\max} \quad (4.1.14)$$

La normalisation (4.1.12) impose :

$$1 \leq |a_J|^2 \leq 0 \quad (4.1.15)$$

et nous pouvons majorer la somme (4.1.13) :

$$\varepsilon_0 = \sum_J |a_J|^2 \varepsilon_0 \leq E_0 \quad (4.1.16)$$

A l'aide de l'expression (4.1.10), il est possible de calculer numériquement les énergies ε_J . Le calcul de la projection exacte des solutions de Hartree-Fock dans la couche 2s-1d ^[6] a été effectué à partir de cette expression. Dans nos calculs, nous n'avons pas pu le faire, car il faudrait l'appliquer sur la fonction d'onde $|\psi\rangle$ corrélée avec les mélanges à 2p-2t (2.3.1), qui est une somme de déterminants de Slater. Il faudrait répéter le calcul de projection

pour chacun des déterminants du développement (2.3.1). Comme le nombre de configurations à deux particules et deux trous dans la couche 2s-1d monte jusqu'à 55 (pour ^{28}Si), cela représenterait un calcul trop long.

2. Le calcul des moments d'inertie des états déformés

Pour une grande déformation de la fonction d'onde intrinsèque, il est raisonnable de s'attendre à ce que le spectre des fonctions d'onde projetées $|\Phi^J\rangle$ suive la loi

$$E_J = E_{J=0} + A J(J+1) \quad (4.2.1)$$

d'un rotateur^[7]. Le moment d'inertie $\mathcal{J}$ est donné par

$$\mathcal{J} = \frac{1}{2A} \quad (4.2.2)$$

Si les fonctions d'onde projetées $|\Phi^J\rangle$ étaient des vecteurs propres du hamiltonien H avec les valeurs propres données par l'expression (4.2.1), elles seraient toutes les vecteurs propres du hamiltonien

$$\hat{H} = H - A\vec{J}^2, \quad (4.2.3)$$

avec une valeur propre $E_{J=0}$ dégénérée. Pour les projections d'une fonction d'essai $|\Phi_0\rangle$ de particules indépendantes, le spectre obéit à la loi (4.2.1) seulement de façon approchée. Pour une fonction d'onde $|\Phi_0\rangle$ donnée, le calcul du moment d'inertie se ramène à un problème variationnel simple, où l'on minimise l'erreur commise en considérant la fonction d'onde $|\Phi_0\rangle$ comme un vecteur propre du hamiltonien $\hat{H}$:

$$\hat{H}|\Phi_0\rangle = E_{J=0}|\Phi_0\rangle + |X\rangle \quad (4.2.4)$$

L'erreur sera égale à :

$$\langle X(A)|X(A)\rangle = \langle \Phi_0 | (H - A\vec{J}^2 - E_{J=0})^2 | \Phi_0 \rangle \quad (4.2.5)$$

La minimisation par rapport au paramètre A

$$\delta \langle X(A) | X(A) \rangle = 0 \quad (4.2.6)$$

mène à la formule de Skyrme^[8] pour le paramètre du moment d'inertie :

$$A = \frac{\langle \Phi_0 | \vec{H} \vec{J}^2 | \Phi_0 \rangle - \langle \Phi_0 | H | \Phi_0 \rangle \langle \Phi_0 | \vec{J}^2 | \Phi_0 \rangle}{\langle \Phi_0 | \vec{J}^4 | \Phi_0 \rangle - [\langle \Phi_0 | \vec{J}^2 | \Phi_0 \rangle]^2} \quad (4.2.7)$$

Au cas où le spectre obéit exactement à la loi (4.2.1), il est facile de montrer que l'expression pour le moment d'inertie A correspond à l'expression (4.2.7) donnée par Skyrme.

Nous allons calculer la valeur moyenne

$$\langle \Phi_0 | \widehat{H} \vec{J}^2 | \Phi_0 \rangle = \sum_J |a_J|^2 \langle \Phi^J | \widehat{H} \vec{J}^2 | \Phi^J \rangle, \quad (4.2.8)$$

où les $|\Phi^J\rangle$ sont les vecteurs appartenant à l'ensemble défini par (4.1.11)

$$\langle \Phi^J | \widehat{H} \vec{J}^2 | \Phi^J \rangle = \langle \Phi^J | \widehat{H} | \Phi^J \rangle J(J+1) = \langle \Phi^J | \widehat{H} | \Phi^J \rangle \langle \Phi^J | \vec{J}^2 | \Phi^J \rangle \quad (4.2.9)$$

$$\begin{aligned} \langle \Phi^J | \widehat{H} | \Phi^J \rangle &= \langle \Phi^J | H | \Phi^J \rangle - A \langle \Phi^J | \vec{J}^2 | \Phi^J \rangle = E_{J=0} + AJ(J+1) - AJ(J+1) \\ &= E_{J=0} = \langle \Phi_0 | \widehat{H} | \Phi_0 \rangle. \end{aligned} \quad (4.2.10)$$

En se servant de la relation (4.1.11), nous obtenons

$$\langle \Phi_0 | \widehat{H} \vec{J}^2 | \Phi_0 \rangle = \langle \Phi_0 | \widehat{H} | \Phi_0 \rangle \langle \Phi_0 | \vec{J}^2 | \Phi_0 \rangle \quad (4.2.11)$$

et

$$\langle \Phi_0 | \vec{H} \vec{J}^2 - A \vec{J}^4 | \Phi_0 \rangle = \langle \Phi_0 | H - A \vec{J}^2 | \Phi_0 \rangle \langle \Phi_0 | \vec{J}^2 | \Phi_0 \rangle \quad (4.2.12)$$

d'où l'on obtient la formule (4.2.7).

Le calcul de A nous donne la possibilité d'estimer la position des niveaux rotationnels engendrés par une fonction d'onde intrinsèque $|\Phi_0\rangle$, toujours sous la condition de validité de l'hypothèse (4.2.1).

Si la fonction d'onde $|\Phi_0\rangle$ est une fonction d'onde des particules indépendantes obtenue par un calcul variationnel, il est commode de calculer les valeurs moyennes $\langle \Phi_0 | \vec{H} \vec{J}^2 | \Phi_0 \rangle$ et $\langle \Phi_0 | \vec{J}^4 | \Phi_0 \rangle$ en insérant la fermeture,

qui se constitue de sous-espace à 2p-2t uniquement. Ce sous-espace est fini au cas où l'on ne mélange pas les couches majeures d'oscillateur harmonique. Les éléments de matrice $\langle \Phi_0 | H | 1p-1t \rangle$ sont égaux à zéro. Les opérateurs H et $\vec{J}^2$ sont des opérateurs à un et deux corps et ils ne peuvent pas lier le fondamental aux excitations à 3p-3t, 4p-4t, etc... Mais si la fonction d'onde $|\Phi_0\rangle$ est corrélée, la formule (4.2.7) devient difficile à calculer.

Il y a une procédure variationnelle due à Levinson^[9] pour calculer le moment d'inertie A , qui tient compte à la fois de la variation par rapport au paramètre A et à la fonction d'essai $|\Phi_0\rangle$. D'abord, on minimise l'énergie $\langle \Phi_0 | H - A\vec{J}^2 | \Phi_0 \rangle$ en la faisant varier par rapport à la fonction d'onde $|\Phi_0\rangle$ pour un A fixe. C'est un calcul de type Hartree-Fock pour le hamiltonien $\hat{H} = H - A\vec{J}^2$. Ensuite, on minimise l'erreur $\langle X(A) | X(A) \rangle$ en fonction de A :

$$\langle X(A) | X(A) \rangle = \langle \Phi(A) | [\hat{H} - E_{J=0}(A)]^2 | \Phi(A) \rangle \quad . \quad (4.2.13)$$

En insérant la fermeture $\sum_I |I\rangle \langle I|$ où $|I\rangle$ sont les excitations à deux particules et deux trous, on arrive à l'expression

$$\langle X(A) | X(A) \rangle = \sum_I |\langle \Phi(A) | (H - A\vec{J}^2) | I \rangle|^2 \quad . \quad (4.2.14)$$

Au cas où la déformation est grande, (4.2.14) est une fonction de A rapidement variable et de ce fait la détermination de A devient très précise.

3. Le traitement des corrélations à partir de la base déformée. Les effets parasites

La diagonalisation dans l'espace à deux particules et deux trous est exposée à une complication due au fait que l'état fondamental non perturbé $|\Phi_0\rangle$ et aussi bien l'état fondamental perturbé $|\psi\rangle$ (2.3.1) sont des états déformés et par conséquent ils ne sont pas des vecteurs propres d'opérateur $\vec{J}^2$ du moment cinétique total.

Nous savons que l'on trouve toujours un gain en énergie en projetant le moment cinétique (4.1.16). Supposons que l'on cherche à diagonaliser la matrice hamiltonienne dans tout l'espace des configurations de la couche 2s-1d.

H étant un opérateur scalaire et $[H, \vec{J}^2] = 0$ dans cet espace, les vecteurs propres d'opérateur H sont en même temps les vecteurs propres de l'opérateur $\vec{J}^2$. Nous désignerons par ΔE le gain en énergie par rapport à l'énergie du fondamental non perturbé :

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \langle \Phi_0 | H | \Phi_0 \rangle + \Delta E \quad , \quad (4.3.1)$$

où $|\psi\rangle$ représente l'état fondamental perturbé (2.3.1) et $|\Phi_0\rangle$ représente l'état fondamental non perturbé.

Il y a plusieurs contributions à ΔE . Une partie de ΔE est due au gain en énergie qui vient de la projection de l'état $|\Phi_0\rangle$ sur le moment cinétique. Dans le cas où l'espace est tronqué, $|\psi\rangle$ cesse d'être un vecteur propre de $\vec{J}^2$, mais il reste toujours un gain en énergie dû à la projection partielle de l'état $|\Phi_0\rangle$ sur le moment cinétique. Nous ne voulons pas inclure dans $|\psi\rangle$ les mélanges à deux particules et deux trous qui sont dus à la projection sur le moment cinétique, car dans ce cas les mélanges à 2p-2t dépendraient entièrement du moment cinétique sur lequel la projection de l'état $|\psi\rangle$ a été effectuée et la notion d'état intrinsèque serait perdue.

Il faut trouver une bonne approximation au calcul de ΔE sans inclure la partie parasite provenant de la projection de l'état $|\Phi_0\rangle$ sur le moment cinétique. La première idée serait de diagonaliser la matrice hamiltonienne de $\hat{H} = H - A\vec{J}^2$ dans l'espace à deux particules et deux trous. Pour cela, nous aurions besoin d'un calcul précis du moment d'inertie du système perturbé. Il est vrai que la formule de Skyrme (4.2.7) reste valable même pour une fonction d'onde qui est représentée par une somme de déterminants de Slater, mais le calcul des valeurs moyennes $\langle \psi | H \vec{J}^2 | \psi \rangle$ et $\langle \psi | \vec{J}^4 | \psi \rangle$ mène aux complications semblables à celles qui apparaissent dans le calcul de la projection exacte. La méthode de Levinson, décrite dans le paragraphe précédent, ne peut pas être appliquée non plus, pour la même raison (au cas où la fonction $|\psi\rangle$ contient les corrélations, l'expression $\sum_I |I\rangle \langle I|$ où $|I\rangle$ sont les états à 2p-2t, cesse d'être la fermeture complète).

4. La méthode d'élimination des états parasites^[10]

Les états projetés peuvent être écrits à l'aide de l'intégrale de

Hill-Wheeler (4.1.2). Après rotation, la fonction d'onde

$$R(\Omega) |\Phi_0\rangle = e^{-i\beta J_y} |\Phi_0\rangle \quad (4.4.1)$$

qui intervient dans les intégrales (4.1.10) peut être développée sur l'ensemble des états propres du hamiltonien H_0 (3.1.4) :

$$R(\Omega) |\Phi_0\rangle = S_0 |\Phi_0\rangle + \sum_{1p1t} S_{1p1t} |1p-1t\rangle + \sum_{2p2t} S_{2p2t} |2p-2t\rangle + \dots \quad (4.4.2)$$

Si nous nous limitons à l'espace tronqué à deux particules et deux trous, l'état tourné $e^{-i\beta J_y} |\Phi_0\rangle$ (4.4.1) aura dans ce sous-espace une composante qui contribuera au gain total en énergie ΔE résultant de la diagonalisation du hamiltonien H , dans l'espace à deux particules et deux trous. Nous ne voulons pas admettre un mélange de configurations à $2p-2t$ qui corresponde à la rotation de $|\Phi_0\rangle$, car nous voulons que notre état corrélé $|\psi\rangle$ reste un état intrinsèque.

Pour calculer l'état parasite, nous développons l'opérateur de rotation :

$$e^{-i\beta J_y} |\Phi_0\rangle = |\Phi_0\rangle - i\beta J_y |\Phi_0\rangle - \frac{\beta^2}{2} J_y^2 |\Phi_0\rangle \quad (4.4.3)$$

La composante $J_y |\Phi_0\rangle$ est un état à une particule et un trou, qui ne produit pas de mélange à l'état $|\Phi_0\rangle$, car nous exigeons que la fonction d'onde de l'état fondamental corrélé $|\psi\rangle$ soit un état propre de l'opérateur J_z avec la valeur propre $M=0$. Pour la même raison, pour tous les éléments de matrice de l'opérateur J_y^2 dans l'espace de configurations, on aura

$$\langle I | \vec{J}^2 | J \rangle = 2 \langle I | J_y^2 | J \rangle \quad (4.4.4)$$

de sorte qu'il nous reste à éliminer l'état parasite normalisé :

$$|S\rangle = \frac{1}{N^{1/2}} \vec{J}^2 |\Phi_0\rangle = \frac{1}{N^{1/2}} \sum \langle I | \vec{J}^2 | \Phi_0 \rangle |I\rangle \quad (4.4.5)$$

où $|I\rangle$ désigne les configurations à deux particules et deux trous (2.3.6) et

N est le facteur de normalisation

$$N = \sum_I |\langle I | \vec{J}^2 | \Phi_0 \rangle|^2 = \langle \Phi_0 | \vec{J}^4 | \Phi_0 \rangle - \langle \Phi_0 | \vec{J}^2 | \Phi_0 \rangle^2 \quad (4.4.6)$$

Ainsi, nous définissons l'opérateur de projection

$$Q_S = 1 - |S\rangle \langle S| \quad , \quad (4.4.7)$$

qui projette l'état parasite hors de notre espace. Ensuite, nous remplaçons la matrice hamiltonienne $\langle I | H | J \rangle$ par

$$\langle I | Q_S H Q_S | J \rangle \quad (4.4.8)$$

et nous la diagonalisons. Une des valeurs propres trouvées sera zéro, car un des vecteurs de l'espace à $2p-2t$ - c'est-à-dire l'état parasite - est une combinaison linéaire des autres. Nous l'éliminons de l'espace des configurations et nous travaillons sur la nouvelle base, qui est orthogonale à l'état parasite.

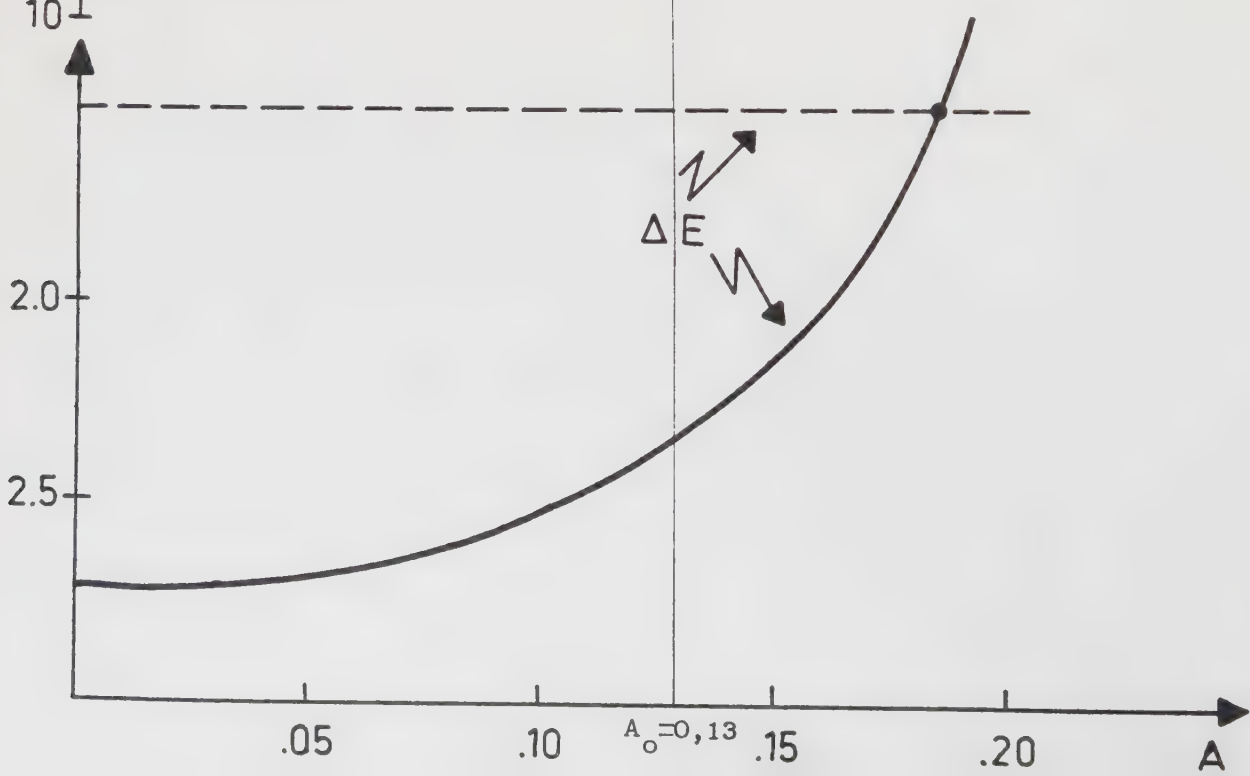
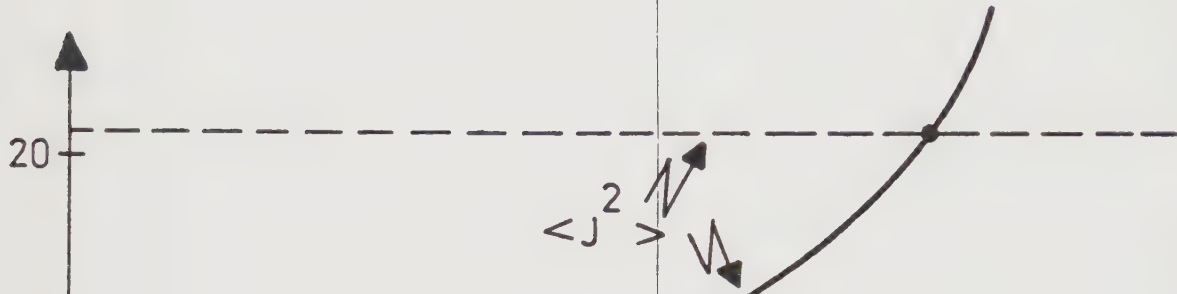
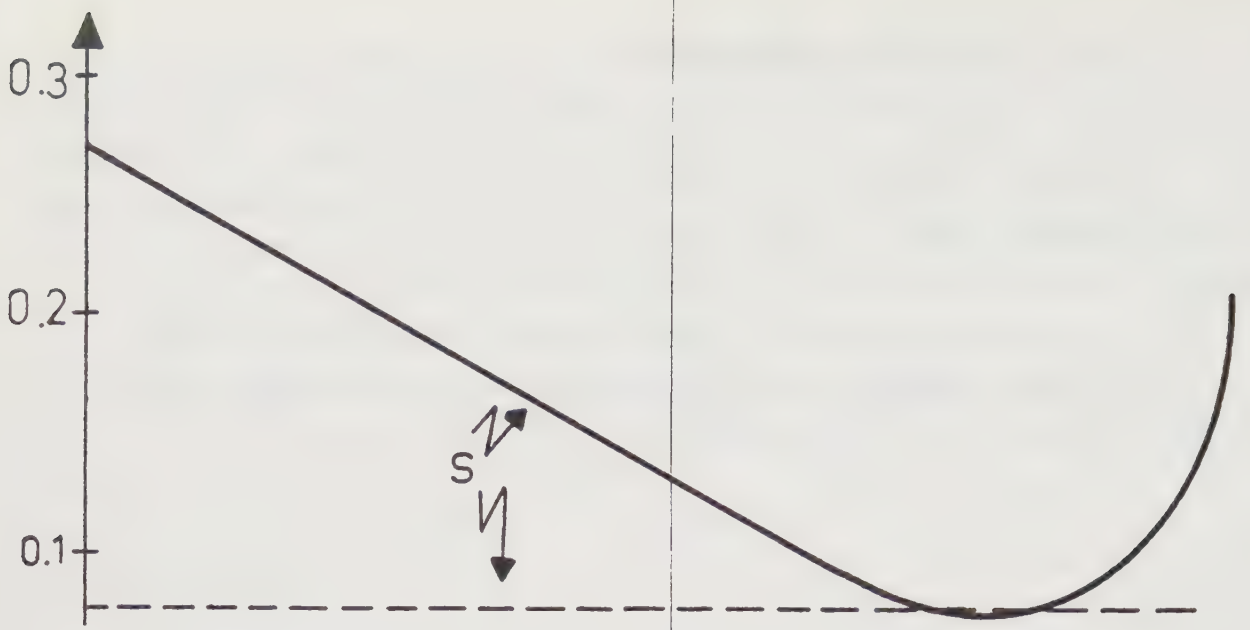
Nous avons éliminé un seul état parasite. L'espace des configurations qui reste n'est pas rigoureusement orthogonal aux autres états parasites. Par exemple, il contient des composantes des configurations à $1p-1t$ ayant subi une rotation. Nous ne pensons pas que le hamiltonien mélange de tels états, ce qui est confirmé par la vérification qui suit.

On peut vérifier cette méthode en diagonalisant successivement le hamiltonien $\hat{H} = H - A\vec{J}^2$ sans éliminer l'état parasite et en l'éliminant. Si la procédure est bonne, le gain $\Delta E(A)$ devrait devenir indépendant de A après l'élimination. Le résultat est illustré sur la Figure 4.1. Comme le montrent les lignes en pointillé, la méthode est très efficace. En outre, pour un noyau bien déformé, le point d'intersection de la ligne en pointillé avec la ligne en trait plein nous donne une estimation de A , car pour cette valeur de A il n'y a pas de gain en énergie de $\hat{H}$ provenant de la projection sur le moment cinétique. Il est très satisfaisant que les lignes en trait plein et en pointillé qui représentent ΔE et $\langle \psi | \vec{J}^2 | \psi \rangle$ se coupent à la même valeur de A . Pour cette valeur de A , l'intensité totale S due au mélange $2p-2t$ est près

de son minimum. La ligne verticale sur la Figure 4.1 indique la valeur A_0 (calculée avec la formule de Skyrme, en moyennant dans l'état $|\Phi_0\rangle$). A est plus grand que A_0 , ce qui veut dire, que les mélanges à deux particules et deux trous abaissent le moment d'inertie.

Figure 4.1

Le gain en énergie ΔE , la valeur moyenne du moment cinétique $\langle J^2 \rangle$ et l'intensité totale S des configurations à 2p-2t en fonction de paramètre du moment d'inertie A . La figure correspond aux calculs faits pour ^{28}Si , la solution aplatie. Les lignes en traits pleins correspondent à la diagonalisation complète. Les lignes en pointillé correspondent au calcul avec l'élimination de l'état parasite.



CHAPITRE 5

APPLICATION AU CALCUL DU MELANGE DES CONFIGURATIONS A DEUX PARTICULES ET DEUX TROUS DANS LA COUCHE 2s-1d

1. Situation expérimentale

Les calculs de Hartree-Fock qui ont très bien réussi à décrire les formes d'équilibre des noyaux déformés appartenant à la première moitié de la couche 2s-1d ^{[6][11]}, n'arrivent pas à décrire les déformations du ²⁸Si et du ³²S. La théorie de Hartree-Fock tend à favoriser les solutions déformées pour ces noyaux tandis que les données expérimentales suggèrent que le ³²S est un noyau sphérique et que le ²⁸S n'a pas une déformation stable ^[12]. En particulier, la théorie de Hartree-Fock prévoit que les solutions allongées dans la première moitié de la couche 2s-1d et les solutions aplaties dans la seconde moitié sont les solutions axiales ayant l'énergie la plus basse. Pour le ²⁸Si, qui se trouve au milieu de la couche, le calcul de Hartree-Fock donne deux solutions axiales, une allongée et l'autre aplatie, les deux solutions étant pratiquement dégénérées en énergie. Pourtant, les données expérimentales ne montrent aucun changement abrupt de la forme des états intrinsèques ^[13]. Dans le ²⁸Si la bande de rotation engendrée par l'état déformé de Hartree-Fock a un moment d'inertie qui est trop grand d'un facteur deux par rapport au spectre expérimental. Cela suggère que la théorie de Hartree-Fock donne une déformation trop grande à l'état intrinsèque. Au-delà du ²⁸Si, dans la région du ³²S les déformations aplaties n'ont pas été observées et les données expérimentales suggèrent le couplage j-j, c'est-à-dire que les noyaux sont sphériques ^[12].

2. Comment améliorer l'approximation de Hartree-Fock ?

Si l'on cherche à améliorer l'approximation de Hartree-Fock en ajoutant des corrélations à deux corps, on pourrait essayer d'appliquer la théorie de Hartree-Bogolyubov en espérant que la procédure variationnelle de Hartree-Bogolyubov favorisera les solutions moins déformées. Mais, comme le montrent les calculs de L. Salpathy, D. Goss et M.K. Banerjee ^[14], la procédure H.F.B. converge sans

exception vers la solution H.F. pour les noyaux pair-pairs $N=Z$ entre 1^{16}O et le ^{40}Ca . D'une part les grandes lacunes en énergie qui apparaissent dans le spectre des orbitales H.F. des noyaux pair-pairs $N=Z$, semblent défavoriser les corrélations de paires. D'autre part, nos calculs^[10] montrent l'importance des corrélations de paires $T=0$ en utilisant une force de Rosenfeld. La fonction d'essai H.F.B. ne contient pas de paires $T=0$ neutron-proton et il est difficile de soutenir qu'elles produisent des effets négligeables pour ces noyaux.

Une autre façon d'améliorer l'approximation de Hartree-Fock est de prendre une solution de Hartree-Fock comme base pour le calcul des perturbations. Dans ce chapitre, nous allons calculer le mélange des configurations à deux particules et deux trous (2p-2t) aux états de Hartree-Fock par une diagonalisation exacte et nous allons déterminer leur effet sur les déformations d'équilibre des noyaux. Dans ce calcul les orbitales de particule et les orbitales de trou seront limitées aux configurations de la couche 2s-1d de l'oscillateur harmonique. Les premiers calculs de M.R. Pal et A. Stamp^{[15][16]} ont inclus seulement une partie des configurations (2p-2t) composées de paires ayant $T=1$ (et encore ils ne les ont pas incluses toutes). Ils ont négligé les configurations 2p-2t composées de paires d'isospin $T=0$ qui se trouvent être dominantes et ils n'ont pas éliminé les états parasites dus à la non-conservation du moment cinétique.

Dans le paragraphe suivant, nous allons décrire une procédure^[10] qui nous permet d'étudier la dépendance de l'énergie totale (le mélange des configurations à deux particules et deux trous inclus) sur le paramètre de déformation δ de Nilsson.

3. Le calcul du mélange des configurations à deux particules et deux trous

Comme point de départ, nous nous servons du hamiltonien de Nilsson^[1] :

$$h_{ij}^{\text{Nilss}} = \varepsilon_i \delta_{ij} - \delta \langle i | r^2 Y_{20}(\theta) | j \rangle \quad (5.3.1)$$

Avec $|i\rangle$ nous désignons les fonctions d'onde de l'oscillateur harmonique sphérique. L'indice i remplace l'ensemble de nombres quantiques $\{n\ell jm\}$ dans la couche 2s-1d de l'oscillateur. Les ε_i sont les énergies de particule indépendante choisies selon la procédure décrite dans le paragraphe suivant. En

diagonalisant la matrice (5.3.1) on obtient les orbites déformées de Nilsson :

$$|\lambda(\delta)\rangle = \sum_i c_i^\lambda(\delta) |i\rangle \quad , \quad (5.3.2)$$

c_i^λ sont les composantes des vecteurs propres résultant de la diagonalisation du hamiltonien (5.3.1). Elles dépendent du paramètre δ de la déformation et elles donnent une excellente base de départ pour les calculs self-consistents^[6]. Les vecteurs propres (5.3.2) pour une déformation δ donnée sont dans beaucoup de cas^[6] très proches des orbites de Hartree-Fock. Par contre, les énergies correspondant aux vecteurs propres (5.3.2) ne représentent pas une bonne approximation aux énergies des orbites obtenues par les calculs self-consistents. Le hamiltonien de Nilsson ne contient pas de terme non-local et ne peut pas reproduire la lacune en énergie entre les états occupés et les états non-occupés.

Dans cette base déformée, nous calculons les éléments de matrice des configurations à deux particules et deux trous du hamiltonien

$$H = E_0 + H_0 + V_{\text{res}} \quad E_0 = \langle \Phi_0 | H | \Phi_0 \rangle \quad (5.3.3)$$

qui a été défini dans (3.1.2) et (3.1.3). Le hamiltonien à un corps est défini comme

$$H_0 = \sum_{\lambda\mu} e_{\lambda\mu} : b_\lambda^+ b_\mu : \quad (5.3.4)$$

où

$$e_{\lambda\mu} = \sum_i c_i^\lambda \varepsilon_i c_i^\mu + \sum_{\rho \text{ occ.}} \langle \lambda\rho | v | \mu\rho \rangle \quad (5.3.5)^*$$

et

$$V_{\text{res}} = \frac{1}{4} \sum_{\lambda\mu\delta\rho} \langle \lambda\mu | v | \delta\rho \rangle : b_\lambda^+ b_\mu^+ b_\rho b_\delta : \quad . \quad (5.3.6)$$

Le produit normal est pris par rapport à l'état $Op-Ot \quad |\Phi_0\rangle$.

v représente la force Rosenfeld dont les paramètres sont donnés dans le paragraphe suivant. La somme s'étend sur tous les états occupés. Le remplissage est défini selon les valeurs propres résultant de la diagonalisation du hamil-

* Nos éléments de matrice $\langle \lambda\rho | v | \mu\rho \rangle$ sont toujours antisymétrisés.

tonien (5.3.1). On remplit les orbites correspondantes aux valeurs propres les plus basses.

Après avoir défini le hamiltonien à un corps, on peut procéder à la diagonalisation de la matrice du hamiltonien (5.3.3).

Nous allons noter les configurations à deux particules et deux trous, dont la définition et le couplage sont donnés dans le Chapitre 2, § 3 , expressions 9 et 10 , par des lettres capitales :

$$|I\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|ij, \alpha\beta, T\rangle + |\tilde{i}\tilde{j}, \tilde{\alpha}\tilde{\beta}, T\rangle \right) . \quad (5.3.7)$$

La matrice du hamiltonien est la suivante :

$$H_{IJ} = \langle I | H | J \rangle , \quad (5.3.8)$$

où H est donné par (5.3.3). Dans le Chapitre 4, § 4 , nous avons montré qu'il faut éliminer l'état parasite $\vec{J}^2 | \Phi_0 \rangle$ si on veut que l'état perturbé soit un état intrinsèque. Il faut donc diagonaliser la matrice :

$$\langle I | Q_S H Q_S | J \rangle . \quad (5.3.9)$$

La définition de l'opérateur Q_S est donnée par les expressions (4.4.5), (4.4.6) et (4.4.7). Nous allons désigner les composantes des vecteurs propres $|N\rangle$ sortants de la diagonalisation de la matrice (5.3.8) dans l'espace à deux particules et deux trous $\{I\}$ par X_I^N . Les valeurs propres seront E_N . Le gain en énergie est donné par l'expression (3.4.20) :

$$\Delta E(\delta) = \sum_{I,J} \sum_N V_{OI} \frac{X_I^N X_J^N}{-E_N} V_{JO} . \quad (5.3.10)$$

Les amplitudes des configurations à deux particules et deux trous dans l'état fondamental perturbé sont :

$$D_I = \sum_J \sum_N \frac{X_I^N X_J^N V_{JO}}{-E_N} \quad (5.3.11)$$

conformément à l'expression (3.4.21).

L'expression pour l'énergie totale est la suivante :

$$E = E_0 + \Delta E = \sum_{occ} e_{\lambda\lambda} - \frac{1}{2} \sum_{pocc} \langle \lambda\rho | v | \lambda\rho \rangle + \Delta E \quad . \quad (5.3.12)$$

Dans le paragraphe 4 nous allons discuter le choix des paramètres et dans le paragraphe 5, les résultats des calculs numériques.

4. Le choix des paramètres

Le choix des paramètres pour un calcul limité à la couche 2s-1d a été discuté par G. Ripka^[6,18], et nous allons en donner le résumé.

Les paramètres à déterminer sont :

- 1) La constante $\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ de l'oscillateur harmonique.
- 2) Les énergies de particule indépendante ε_j . Dans nos calculs, qui sont effectués dans la couche 2s-1d, ce sont les énergies des états $j = d_{5/2}$, $2s_{1/2}$ et $d_{3/2}$.
- 3) Les paramètres de la force utilisée. Nos calculs ont été effectués avec une force Rosenfeld ayant une dépendance radiale Gaussienne.

Dans les calculs de type Hartree-Fock dans une seule couche majeure d'oscillateur harmonique, le rayon quadratique moyen d'un noyau ne dépend que de la constante $\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ de l'oscillateur harmonique, parce que les rayons quadratiques $\langle j m \tau | r^2 | j m \tau \rangle$ de tous les états appartenant à une même couche majeure sont égaux. Pour chaque noyau, la constante α est déterminée par le rayon quadratique moyen qui est mesuré par la diffusion élastique des électrons^[17].

Pour un noyau, qui a M_p orbites de protons, la valeur moyenne de l'opérateur monopolaire $\sum_{i=1}^Z r_{ip}^2$ est :

$$\langle r^2 \rangle = \frac{1}{\alpha^2} \left[18 + \frac{7M_p}{2} \right] \quad (5.4.1)$$

et le rayon quadratique moyen est

$$R = \sqrt{\frac{\langle r^2 \rangle}{Z}} \quad . \quad (5.4.2)$$

Les valeurs de α , obtenues à partir du rayon quadratique moyen mesuré par la diffusion élastique des électrons^[17] sont données dans le Tableau 1.

Les énergies de particule indépendante ε_j peuvent être obtenues par les différences d'énergie de liaison :

$$[^{17}\text{O}]_j - [^{16}\text{O}] = \varepsilon_j = \langle \Phi_0 | b_{jm\tau} H b_{jm\tau}^+ | \Phi_0 \rangle - \langle \Phi_0 | H | \Phi_0 \rangle \quad (5.4.3)$$

pour $j = 1d_{5/2}$, $2s_{1/2}$ et $1d_{3/2}$.

$[^{16}\text{O}]$ est l'énergie de liaison de ^{16}O . $[^{17}\text{O}]_j$ est l'énergie de liaison d'un état de spin j de ^{17}O . En supposant que le fondamental $5/2^+$ et les états excités les plus bas $1/2^+$ et $3/2^+$ de ^{17}O sont des états à une particule, on obtient les énergies ε_j suivantes dans la couche 2s-1d :

$$\varepsilon_{d_{5/2}} = -4,14 \text{ MeV} \quad \varepsilon_{s_{1/2}} = -3,27 \text{ MeV} \quad \varepsilon_{d_{3/2}} = 0,94 \text{ MeV} \quad (5.4.4)$$

Si on utilise ^{16}O comme un noyau de référence, c'est-à-dire si on le traite comme un coeur inerte, produisant un champ sphérique pour les particules de valence, on peut utiliser les valeurs expérimentales (5.4.4) des énergies ε_j . Cela représente un avantage. Par exemple, on n'obtient pas de terme spin-orbite avec les forces centrales dans le champ sphérique d'un noyau avec les couches majeures remplies. L'utilisation des valeurs expérimentales des énergies ε_j compense en quelque sorte les effets des termes qui manquent dans la force utilisée. Les énergies ε_j qui entrent dans l'expression (5.3.5) devraient en effet correspondre aux énergies de particule indépendante obtenues par un calcul de Hartree-Fock de ^{16}O , mais calculées avec la constante α de l'oscillateur harmonique du noyau considéré. Les valeurs expérimentales (5.4.4) correspondent au calcul de Hartree-Fock de ^{16}O avec la constante α correspondante à ^{16}O . Pour rendre compte de cet effet, on peut considérer la solution sphérique du ^{40}Ca . Les énergies e_j des orbites dans le champ sphérique du ^{40}Ca sont :

$$e_j = \varepsilon_j + \sum_{\mu=1}^{24} \langle jm\tau, \mu | v | jm\tau, \mu \rangle \quad (5.4.5)$$

Toutes les orbites appartenant à la couche 2s-1d sont remplies et les énergies

e_j ne dépendent pas des coefficients C_j^μ . Comme on peut estimer les valeurs expérimentales des énergies e_j à partir des expériences (p,d) sur le ^{40}Ca [19], on peut déterminer les énergies ε_j correspondant à la valeur α du ^{40}Ca ensemble avec l'intensité de la force utilisée.

Si l'on suppose le choix préalable d'une interaction nucléon-nucléon $V_0 v$, dont l'intensité V_0 reste à déterminer, la différence entre les énergies de liaison du ^{40}Ca et de ^{16}O est donnée par l'équation:

$$[^{40}\text{Ca}] - [^{16}\text{O}] = 2 \sum_j (2j+1) \varepsilon_j + \frac{1}{2} V_0 \sum_{\mu\mu'=1}^{24} \langle \mu\mu' | v | \mu\mu' \rangle = -274 \quad * \quad (5.4.6)$$

L'équation (5.4.6) et l'équation (5.4.5) forment un système linéaire, qu'on peut résoudre pour les inconnues ε_j et V_0 . Dans ces équations, il faut utiliser la constante α correspondante à la valeur de α pour ^{40}Ca . Les énergies ε_j pour les noyaux intermédiaires sont obtenues par une extrapolation linéaire pour les valeurs de α correspondantes. La valeur de l'intensité V_0 obtenue pour la force de Rosenfeld

$$v = V_0 e^{-(r/\mu)^2} \cdot \frac{\vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2}{3} [0,3 + 0,7 \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2] \quad (5.4.7)$$

avec une portée $\mu = 1,48 \text{ fm}$ est $V_0 = 70,82 \text{ MeV}$. Les énergies ε_j pour chaque noyau sont tabulées dans le tableau 2.

L'utilisation de la force Rosenfeld est préférable, car les données expérimentales indiquent les grandes lacunes en énergies [16] entre orbites vides et occupées, ce qui exige une forte composante Majorana dans la force effective centrale [16].

5. Les résultats des calculs numériques [10]

Nous avons cherché avec le calcul décrit dans le paragraphe 3 comment varie l'énergie de liaison d'un noyau en fonction du paramètre de déformation lorsqu'on inclut les corrélations à deux particules et deux trous. Dans ce

* La valeur expérimentale est donnée dans la ref. [16].

paragraphe nous allons discuter les résultats des calculs numériques pour les noyaux ^{20}Ne , ^{28}Si et ^{32}S . Ces résultats vont nous servir comme guide pour le calcul self-consistent, qui sera traité dans le chapitre suivant.

Les orbites calculées sont paramétrisées par un seul paramètre de déformation δ [1]. Quand les orbites sont restreintes aux configurations de la couche 2s-1d de l'oscillateur harmonique, les orbites de Nilsson asymptotiques sont obtenues pour $\delta \rightarrow \pm \infty$. Les énergies de particule indépendante et les paramètres de force ont été discutés dans le paragraphe précédent.

La Figure 5.1 montre les valeurs d'énergie non perturbée $E_0 = \langle \Phi_0 | H | \Phi_0 \rangle$ et d'énergie perturbée $E_0 + \Delta E$ en fonction du paramètre de déformation δ pour les noyaux ^{20}Ne , ^{28}Si et ^{32}S .

Pour le ^{20}Ne , le mélange des configurations à deux particules et deux trous dans la couche 2s-1d n'affecte pas la déformation d'équilibre du ^{20}Ne . Le mélange des configurations est petit.

Le mélange à deux particules et deux trous rend le ^{32}S sphérique, ce qui est en accord avec les données expérimentales. Rappelons que le résultat obtenu par le calcul de Hartree-Fock donne une petite déformation aplatie. Dans le ^{32}S , l'intensité totale du mélange à deux particules et deux trous, définie comme :

$$S = \sum_I |D_I|^2 \quad (5.5.1)$$

avec les D_I définies par l'expression (5.3.11), est égale à 0,3.

Le gain en énergie dû à la déformation pour le ^{28}S se trouve considérablement réduit par le mélange à 2p-2t, mais pas encore suffisamment pour rendre le ^{28}Si sphérique.

Dans l'espace des fonctions de Hartree-Fock, la force Rosenfeld se comporte comme une force monopole et une force quadrupole-quadrupole [6]. Les mélanges des configurations de 2p-2t qu'elle produit sont très différents de ceux qui sont produits par une force d'appariement de type (2.3.11). A la déformation zéro, l'intensité des configurations à 2p-2t totale ayant $T=1$ ne représente que 13% et 17% de l'intensité de mélange à 2p-2t totale pour ^{32}S et ^{28}Si respectivement. Environ 80% de l'intensité $T=1$ des configurations à 2p-2t est due aux paires invariantes par renversement du temps, qui seraient produites par une

Figure 5.1

L'énergie non-perturbée (lignes en pointillé) et l'énergie perturbée totale (lignes en trait plein) de ^{20}Ne , ^{28}Si et ^{32}S en fonction du paramètre de déformation δ des orbites de Nilsson.

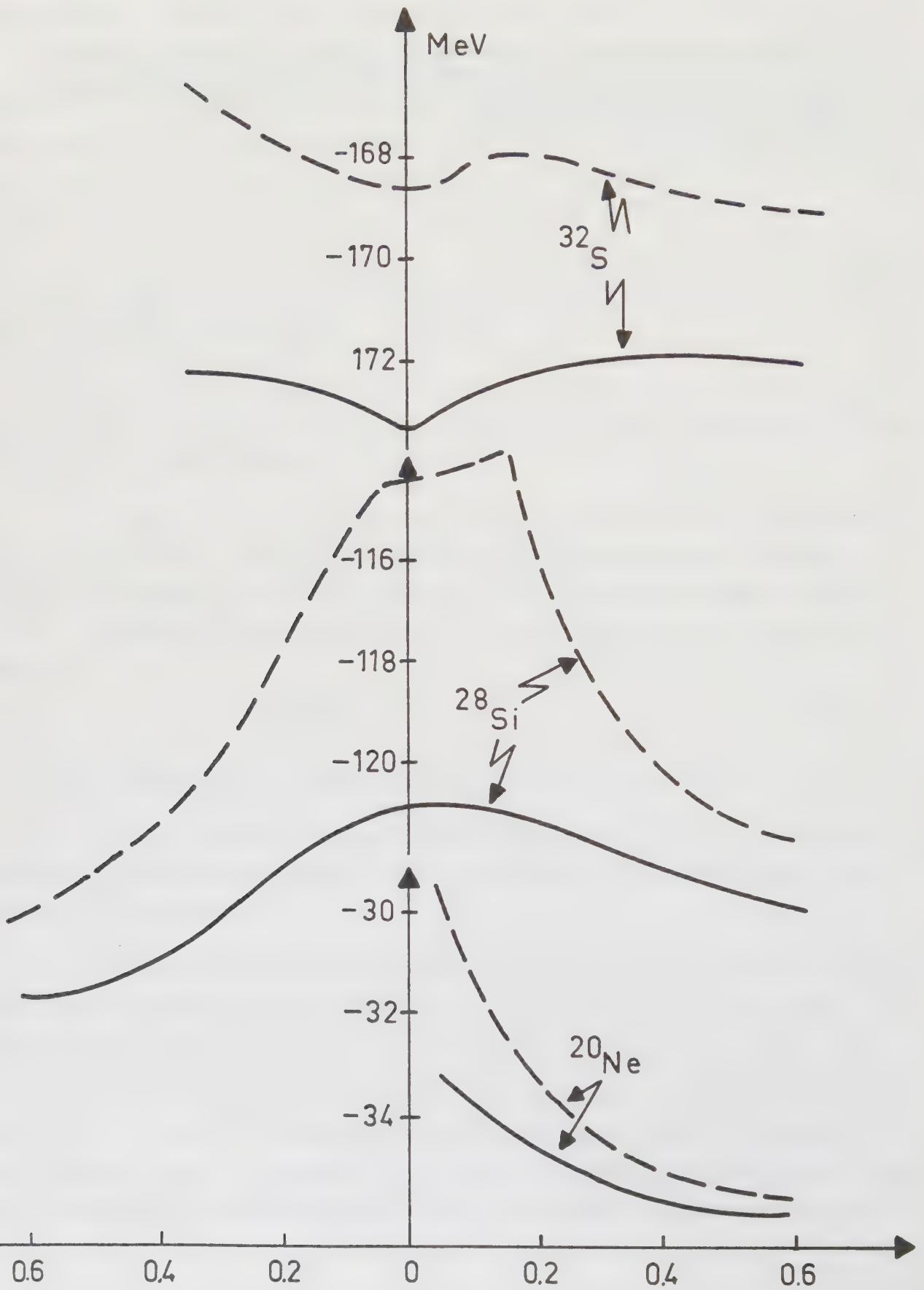


Figure 5.1

force d'appariement. Seulement 30% de l'intensité des configurations à $2p-2t$ ayant $T=0$ est dû aux paires invariantes par renversement du temps, qui seraient produites par une force d'appariement $T=0$ [3].

Dans le chapitre suivant, nous allons exposer un calcul de mélange de configurations à deux particules et deux trous entièrement self-consistent, c'est-à-dire nous allons calculer comment le mélange des configurations à $2p-2t$ change le champ moyen vu par les nucléons. Nous pouvons alors calculer explicitement la fonction d'onde des orbites sans faire l'hypothèse qu'elles sont celles du hamiltonien de Nilsson.

CHAPITRE 6

LE CALCUL SELF-CONSISTENT DU MELANGE DES CONFIGURATIONS A DEUX PARTICULES ET DEUX TROUS

Si on veut calculer la contribution des corrélations à deux particules et deux trous à l'énergie d'état fondamental obtenu par un calcul Hartree-Fock, la procédure décrite dans le Chapitre 5, § 3 reste valable, avec la seule différence, qu'il faut prendre dans l'expression (5.3.2) les orbitales déformées résultant d'un calcul de Hartree-Fock. La matrice du hamiltonien à un corps $e_{\lambda\mu}$ (qui est le hamiltonien de Hartree-Fock dans ce cas) devient diagonale. Nous avons étudié l'influence des corrélations à deux particules et deux trous sur la déformation de la fonction d'onde d'état fondamental. Si nous avons utilisé des orbitales de Hartree-Fock dans ce calcul, on aurait utilisé des orbitales correspondant à un champ moyen obtenu sans tenir compte du mélange des configurations à $2p-2t$.

Dans le langage de diagrammes, le calcul de perturbations à partir d'une solution de Hartree-Fock revient à l'évaluation de diagrammes d'ordre supérieur dans le développement de Goldstone^[4] que l'on calcule avec les propagateurs à un corps dont l'opérateur de masse est évalué au premier ordre. La théorie de Hartree-Fock est une première approximation à un champ effectif ressenti par tous les nucléons. Nous avons donc cherché à améliorer l'approximation de Hartree-Fock en incluant aussi l'influence du mélange des configurations à deux particules et deux trous sur le champ moyen statique. Ce calcul va donc plus loin que la simple utilisation des orbitales de Hartree-Fock pour calculer le mélange à $2p-2t$. Dans les paragraphes suivants, nous allons décrire un calcul variationnel où la fonction d'onde ne sera plus une fonction d'onde de particules indépendantes comme dans la théorie de Hartree-Fock. La matrice densité ρ ne satisfera donc plus la relation $\rho^2 = \rho$. Néanmoins, nous définirons encore un champ statique dont les états propres sont les orbitales qui composeront les configurations à deux particules et deux trous. L'état de zéro particule et zéro trou sera un déterminant de Slater des fonctions d'onde de ces orbitales dans ce champ statique généralisé. Dans le calcul de l'énergie de l'état fondamental, nous rencontrerons le problème du sur-comptage des diagrammes connexes. Il sera résolu

grâce à l'application d'un théorème de C. Bloch^[20]. Dans le paragraphe 6 sera donnée la démonstration de stationnarité de l'énergie totale par rapport aux variations du potentiel externe.

1. Définitions et notations

a) Par des lettres latines $i, j, k, \ell, \dots$ nous allons désigner une base complète d'états à une particule telle que celle de l'oscillateur harmonique sphérique (2.1.4).

Par des lettres grecques $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \dots$ nous allons désigner les orbites déformées que nous développons sur cette base :

$$|\lambda\rangle = \sum_i c_i^\lambda |i\rangle \quad . \quad (6.1.1)$$

Par des lettres majuscules $I, J, K, L, \dots$ nous allons désigner les configurations à deux particules et deux trous définies par (2.3.9) et (2.3.10).

b) La fonction de Green à une particule est définie comme

$$g_{ij}(t_2 - t_1) = -i \langle \psi | T \{ a_i(t_2) a_j^\dagger(t_1) \} | \psi \rangle \quad , \quad (6.1.2)$$

$a_i(t)$ et $a_j^\dagger(t)$ sont les opérateurs d'annihilation et de création dans la représentation de Heisenberg :

$$\begin{aligned} a_i(t) &= e^{iHt} a_i e^{-iHt} \\ a_j^\dagger(t) &= e^{iHt} a_j^\dagger e^{-iHt} \quad . \end{aligned} \quad (6.1.3)$$

La fonction de Green (ou le propagateur habillé) peut être écrite :

$$g_{ij}(t_2 - t_1) = g_{ij}^+(t_2 - t_1) \theta(t_2 - t_1) + g_{ij}^-(t_2 - t_1) \theta(t_1 - t_2) \quad , \quad (6.1.4)$$

+ désigne la partie retardée et - désigne la partie avancée du propagateur.

La fonction de Green libre est définie par :

$$g_i^0(t) = -i [\theta(t) \theta(\varepsilon_i - \varepsilon_F) e^{-i\varepsilon_i t} - \theta(-t) \theta(\varepsilon_F - \varepsilon_i) e^{-i\varepsilon_i t}] \quad (6.1.5)$$

La transformation de Fourier :

$$g_i^0(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} g_i^0(t) e^{i\omega t} dt \quad (6.1.6)$$

donne

$$g_i^0(\omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_i + i\delta_i} \quad , \quad (6.1.7)$$

où

$$\delta_i \begin{cases} = +\delta & \varepsilon_i > \varepsilon_F \\ = -\delta & \varepsilon_i < \varepsilon_F \end{cases} \quad (6.1.8)$$

Les propagateurs des particules libres seront représentés par des lignes montantes $\uparrow$ et les propagateurs de trous libres seront représentés par des lignes descendantes $\downarrow$. Les propagateurs de particule habillée seront représentés par $\parallel$ et les propagateurs de trou habillé seront désignés par $\parallel$.

c) L'opérateur de masse $M_{ij}(\omega)$ est généralement défini comme la somme de tous les diagrammes liés irréductibles

$$\text{Diagram with M in a circle} = \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3} + \text{Diagram 4} + \text{Diagram 5} + \dots \quad (6.1.9)$$

qu'on ne peut pas couper par une seule ligne.

Dans le cas le plus général, l'opérateur de masse dépend du temps (ou bien de l'énergie, selon la représentation). Dans les cas que nous allons considérer, il ne dépendra pas de l'énergie. Nous n'allons considérer que les insertions statiques dans l'opérateur de masse. L'opérateur de masse est utilisé dans le calcul du propagateur habillé à l'aide de l'équation de Dyson :

$$\text{Dressed propagator} = \text{Free propagator} + \text{Diagram with M} \quad (6.1.10)$$

L'expression algébrique correspondante est

$$g_{ij}(\omega) = g_i^0(\omega) + g_k^0(\omega) M_{k\ell}(\omega) g_{\ell j}(\omega) \quad . \quad (6.1.11)$$

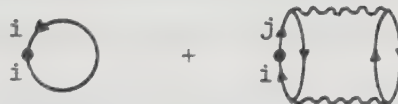
d) La matrice densité à un corps est définie ainsi :

$$\rho_{ij} = \lim_{t_1 \rightarrow t_2 + 0} i g_{ij}(t_2 - t_1) = \langle \psi | a_j^+ a_i | \psi \rangle \quad . \quad (6.1.12)$$

Le nombre de particules est donné par l'expression

$$N = \text{Tr } \rho \quad . \quad (6.1.13)$$

La matrice densité et, par conséquent, les opérateurs à un corps, peuvent se calculer en sommant les diagrammes^[4] connexes d'énergie sur lesquels on insère un point :

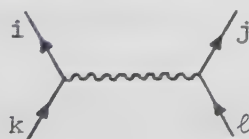
$$\rho_{ij} = \text{diagramme 1} + \text{diagramme 2} \quad (6.1.14)$$


Le point est considéré comme un vertex avec une ligne entrante i et une ligne sortante j donnant comme contribution $\langle a_i^+ a_j \rangle$.

e) Les éléments de matrice $\langle ij|v|k\ell \rangle$ que nous allons utiliser seront les éléments de matrice antisymétrisés de l'interaction nucléon-nucléon :

$$\langle ij|v|k\ell \rangle = \langle 0 | a_j a_i v a_k^+ a_\ell^+ | 0 \rangle = - \langle ij|v|\ell k \rangle \quad . \quad (6.1.15)$$

Les éléments de matrice d'interaction seront graphiquement représentés par

$$\text{diagramme} = \langle ij|v|k\ell \rangle \quad . \quad (6.1.16)$$


2. Les diagrammes représentant l'approximation de Hartree-Fock

L'approximation de Hartree-Fock est l'approximation du premier ordre de l'opérateur de masse M :

$$\text{Diagramme } M^0_{ij} = \text{Diagramme } i \text{---} j \text{ avec un cercle } \lambda \quad (6.2.1)$$

$$M^0_{ij} = \sum_{\lambda \text{ occ.}} \langle i\lambda | v | j\lambda \rangle \quad (6.2.2)$$

Dans notre cas, avec l'insertion de (6.2.1) dans l'équation de Dyson, l'expression (6.1.11) donne :

$$g_{ij}(\omega) = \frac{\delta_{ij}}{\omega - \varepsilon_i + i0} + \frac{\delta_{ik}}{\omega - \varepsilon_i + i0} \sum_{\lambda \text{ occ.}} \langle k\lambda | v | \ell\lambda \rangle g_{\ell j}(\omega) \quad (6.2.3)$$

Il est commode d'écrire l'opérateur de masse à l'aide de la matrice densité. Dans notre cas, la matrice densité s'obtient à partir du diagramme :

$$\rho^0_{\lambda\mu} = \text{Diagramme } \lambda \text{---} \mu = \begin{cases} \delta_{\lambda\mu} & \text{pour les états occupés} \\ 0 & \text{pour les états non occupés} \end{cases} \quad (6.2.4)$$

et l'opérateur de masse dans l'approximation de Hartree-Fock est :

$$M^0_{ij} = \sum_{\lambda \text{ occ.}} \langle i\lambda | v | j\lambda \rangle = \sum_{\lambda\mu} \langle i\lambda | v | j\mu \rangle \delta_{\lambda\mu} = \sum_{\lambda\mu} \langle i\lambda | v | j\mu \rangle \rho^0_{\mu\lambda} \quad (6.2.5)$$

En multipliant (6.2.3) par le dénominateur, on obtient :

$$[(\varepsilon_i - \omega) \delta_{ik} + M^0_{ik}] g_{kj}(\omega) = -\delta_{ij} \quad (6.2.6)$$

Nous introduisons une matrice auxiliaire que l'on reconnaît être le champ de Hartree-Fock :

$$h_{ik} = \varepsilon_i \delta_{ik} + M^0_{ik} \quad (6.2.7)$$

$$(h_{ik} - \omega \delta_{ik}) g_{kj}(\omega) = -\delta_{ij} \quad (6.2.8)$$

Il est commode de résoudre d'abord le problème aux valeurs propres :

$$\sum_j h_{ij} c_j^\alpha = E_\alpha c_i^\alpha \quad . \quad (6.2.9)$$

La matrice inverse $(h - \omega 1)^{-1}$ peut s'exprimer avec l'aide des vecteurs propres c^α et des valeurs propres E_α sortant de la diagonalisation de la matrice h :

$$(h - \omega 1)_{ik}^{-1} = \sum_\alpha \frac{c_i^{\alpha*} c_k^\alpha}{E_\alpha - \omega} \quad . \quad (6.2.10)$$

Par conséquent :

$$g_{kj}(\omega) = \sum_\alpha \frac{c_k^{\alpha*} c_j^\alpha}{\omega - E_\alpha + i\delta} \quad . \quad (6.2.11)$$

On recalcule l'opérateur de masse dans cette nouvelle représentation, on résout à nouveau l'équation (6.2.9) et on recalcule le propagateur habillé (6.2.11), etc., jusqu'à ce que les orbites et les énergies des orbites E_α cessent de changer. La base finale est la base de Hartree-Fock des orbites déformées. A chaque étape du processus itératif, il faut redéfinir le remplissage, par exemple on peut remplir les orbites dont les énergies sont les plus basses.

La matrice densité, exprimée dans la représentation $i, j, \dots$ est :

$$\rho_{ik}^0 = \sum_{\alpha \text{ occ.}} c_i^{\alpha*} c_k^\alpha \quad . \quad (6.2.12)$$

Cette forme simple de la matrice densité est due au fait qu'elle résulte d'une fonction d'onde des particules indépendantes, viz. d'un seul déterminant de Slater. Cette propriété est caractérisée par le fait que la matrice densité satisfait à l'équation $\rho^2 = \rho$.

Les pôles $\omega = E_\alpha$ de la fonction de Green (6.2.11) donnent les énergies des orbites de Hartree-Fock :

$$\omega \equiv E_\alpha = \varepsilon_\alpha + \sum_{\mu=1} \langle \alpha_\mu | v | \alpha_\mu \rangle \quad , \quad (6.2.13)$$

où ε_α est l'énergie non perturbée dans la représentation déformée :

$$\varepsilon_\alpha = \sum_i c_i^{\alpha*} \varepsilon_i c_i^\alpha \quad . \quad (6.2.14)$$

3. L'énergie d'état fondamental de Hartree-Fock

La fonction d'onde d'état fondamental Hartree-Fock est représentée par un seul déterminant de Slater et on peut obtenir l'expression pour l'énergie d'état fondamental en appliquant le théorème de Wick. Nous allons désigner la fonction de l'état fondamental de Hartree-Fock par $|\bar{\Phi}\rangle$:

$$|\bar{\Phi}\rangle = b_{\lambda_1}^+ b_{\lambda_2}^+ \dots b_{\lambda_A}^+ |0\rangle \quad . \quad (6.3.1)$$

En appliquant le théorème de Wick, on obtient l'expression suivante pour l'énergie du système :

$$E_{HF} = \langle \bar{\Phi} | H | \bar{\Phi} \rangle = \sum_{\lambda=1}^A \varepsilon_\lambda + \frac{1}{2} \sum_{\lambda, \mu=1}^A \langle \lambda_\mu | v | \lambda_\mu \rangle \quad . \quad (6.3.2)$$

Les sommes sont limitées aux orbitales occupées. On peut exprimer E_{HF} avec l'aide des énergies des orbitales (6.2.13) :

$$E_{HF} = \sum_{\lambda \text{ occ.}} E_\lambda - \frac{1}{2} \sum_{\lambda, \mu \text{ occ.}} \langle \lambda_\mu | v | \lambda_\mu \rangle = \sum_{\lambda \text{ occ.}} E_\lambda - \frac{1}{2} \sum_{i, j, k, \ell} \rho_{ji}^o \rho_{k\ell}^o \langle i\ell | v | jk \rangle \quad . \quad (6.3.3)$$

L'énergie de Hartree-Fock correspond à la contribution des seuls diagrammes



(6.3.4)

calculés avec les orbitales de Hartree-Fock.

4. Les corrélations à deux particules et deux trous et le calcul self-consistent de champ statique généralisé

Nous voudrions calculer le changement du champ statique dû aux corrélations à deux particules et deux trous. A cette fin, il faut introduire dans l'opérateur de masse (6.2.1) une sous-série des diagrammes en échelle représentant la contribution des corrélations à deux particules et deux trous au champ statique :

L'interaction

(6.4.1)



(6.4.2)

représente le vertex renormalisé et il correspond à la somme des diagrammes

Il est égal à l'expression (3.4.23)

(6.4.3)

L'opérateur de masse complet que nous calculons est de la forme suivante :

(6.4.4)

Dans ce cas, nous pouvons encore exprimer l'opérateur de masse avec l'aide de la matrice densité

(6.4.5)

à savoir :

$$M_{ij} = M_{ij}^0 + M_{ij}^1 = \sum_{k\ell} \langle ik | v | j\ell \rangle (\rho_{\ell k}^0 + \rho_{\ell k}^1) \quad . \quad (6.4.6)$$

Nous allons calculer la matrice densité ρ^1 à l'aide de la fonction de Green à deux particules et deux trous, dont la définition est donnée dans le chapitre 3. L'expression pour la fonction de Green à deux particules et deux trous, résultant de resommation des diagrammes en échelle est donnée par (3.4.17) :

$$G_{LJ}(\omega) = \sum_N \frac{x_L^N x_J^N}{\omega - E_N + i\delta} , \quad (6.4.7)$$

où les E_N et les x^N résultent de la diagonalisation de la matrice (4.4.8) dans l'espace de configurations à $2p-2t$. La diagonalisation est décrite dans le chapitre 3, § 4.

La connaissance du propagateur $G_{IJ}(\omega)$ nous permet d'évaluer les contributions à ρ^1 des diagrammes (6.4.5) :

$$\begin{aligned} \rho_{jk}^1 &= \sum_{IJKL} v_{OI} G_{IJ}(0) \langle J | a_j^+ a_k | K \rangle G_{KL}(0) v_{LO} = \\ &= \sum_{\substack{IJKL \\ NM}} v_{OI} x_I^N x_J^N \frac{1}{-E_N} \langle J | a_j^+ a_k | K \rangle \frac{1}{-E_M} x_K^M x_L^M v_{LO} = \\ &= \sum_{\substack{J,K \\ N,M}} v_{ON} x_J^N \frac{1}{-E_N} \langle J | a_j^+ a_k | K \rangle \frac{1}{-E_M} x_K^M v_{MO} . \end{aligned} \quad (6.4.8)$$

Par D_I nous allons désigner l'amplitude (3.4.21) d'une configuration à deux particules et deux trous dans l'état fondamental perturbé :

$$D_J = \sum_N v_{ON} x_J^N \frac{1}{-E_N} . \quad (6.4.9)$$

On peut exprimer la matrice densité ρ_{jk}^1 à l'aide des amplitudes D_J :

$$\rho_{jk}^1 = \sum_{JK} D_J \langle J | a_j^+ a_k | K \rangle D_K . \quad (6.4.10)$$

Enfin, la matrice h_{ij} représentant le champ moyen s'exprime encore sous la forme

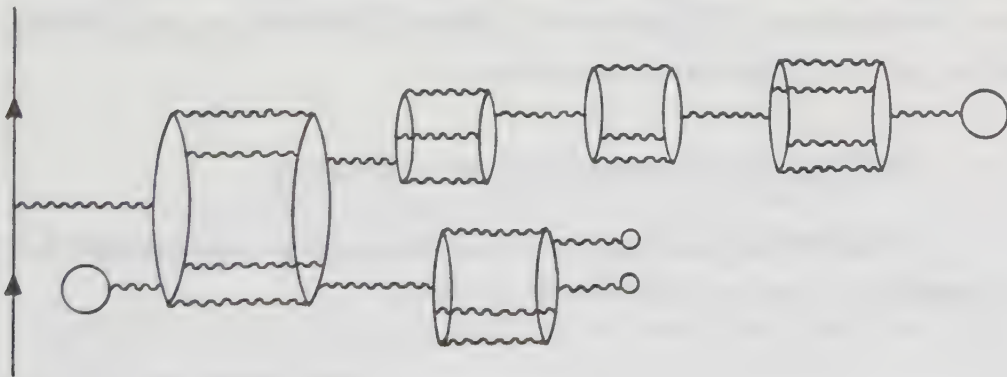
$$h_{ij} = \varepsilon_i \delta_{ij} + M_{ij} . \quad (6.4.11)$$

La diagonalisation de cette matrice nous donne les énergies et les orbitales

des particules indépendantes dans le champ statique généralisé. Le champ est statique, parce que l'opérateur de masse (6.4.6) ne dépend pas de l'énergie. La procédure itérative pour le calcul des orbites est la suivante :

- 1) La matrice du hamiltonien de Nielsson (5.3.1) est diagonalisée pour une valeur fixe du paramètre de déformation δ . Cette diagonalisation donne des orbites de départ.
- 2) On évalue le propagateur $G_{LJ}(\omega)$ dans la représentation déformée de Nielsson en diagonalisant les configurations à $2p-2t$ (les états parasites étant éliminés).
- 3) On évalue la matrice densité $\rho = \rho^0 + \rho^1$ avec l'équation (6.4.10).
- 4) On diagonalise la matrice h (6.4.11).
- 5) On retourne à l'étape 2) avec les vecteurs et les valeurs propres résultant de l'étape 4), jusqu'à ce que les vecteurs et les valeurs propres de la matrice h aussi bien que les amplitudes D_I cessent de changer.

A la fin de ce processus, on a sommé dans l'opérateur de masse tous les diagrammes de la forme :



5. Energie de l'état fondamental. Le comptage des diagrammes connexes

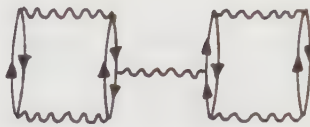
La fonction d'onde de l'état fondamental n'est plus un déterminant de Slater comme dans l'approximation de Hartree-Fock. Elle contient un mélange de configurations. Le théorème de Wick ne peut donc plus être utilisé. Si on essaie de resommer les diagrammes correspondants de la série de Goldstone, on se heurte au problème de surcomptage dès qu'on les calcule avec des propagateurs habillés, c'est-à-dire avec des lignes ayant des insertions.

Par exemple, le diagramme



(6.5.1)

où la double ligne représente un propagateur habillé contient le diagramme



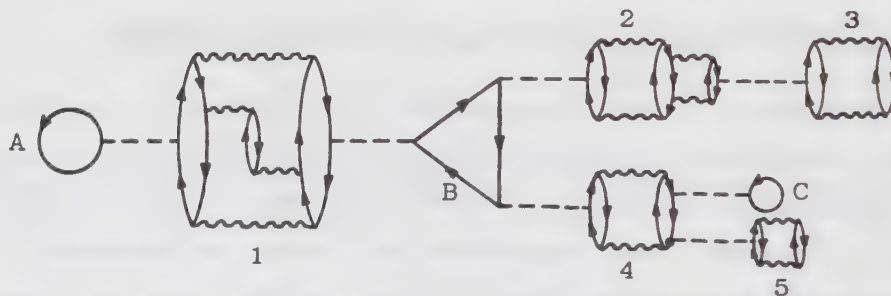
(6.5.2)

mais celui-ci est compté deux fois.

Il existe une méthode générale due à C. Bloch pour corriger les erreurs provenant du surcomptage. Elle est basée sur l'existence d'une relation topologique^[20] qui nous permet de resommer tous les diagrammes de trois façons différentes, en commettant à chaque resommation des erreurs de surcomptage qui se compensent exactement.

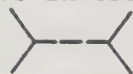
Analyse en arbre des diagrammes connexes

Considérons un diagramme connexe général contribuant à l'énergie du fondamental. Par exemple, le diagramme :



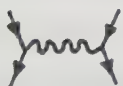
(6.5.3)

On peut analyser ce diagramme de la façon suivante. On distingue d'abord les interactions "disconnectantes". Ce sont celles qui séparent le diagramme en deux lorsqu'on les coupe. Soit n_v le nombre des interactions disconnectantes d'un diagramme $\mathcal{D}$. Le diagramme (6.5.3) a $n_v = 7$ interactions disconnectantes. Elles sont désignées par un trait en pointillé .

Les interactions désignées par  et les interactions désignées par  sont les mêmes interactions. Les deux lignes d'interaction sont désignées différemment uniquement pour distinguer les interactions disconnectantes dans la topologie des diagrammes. Bien que nous ne dessinions que les éléments de matrice directs, nos interactions représentent à la fois le terme direct et le terme d'échange. C'est-à-dire que le vertex



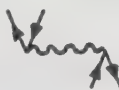
comprend aussi



comprend aussi



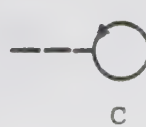
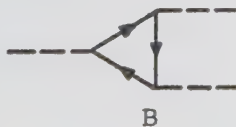
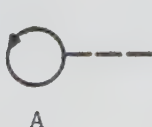
comprend aussi



Pour qu'un vertex représente une interaction disconnectante, il suffit que le terme direct ou le terme d'échange soit une interaction disconnectante.

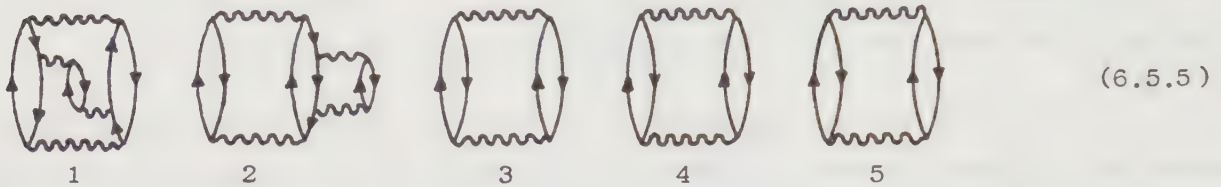
Une fois qu'on a coupé toutes les interactions disconnectantes, il reste deux types de structures :

a) Les colliers - ce sont des boucles fermées de propagateurs qui joignent seulement des interactions disconnectantes. Le diagramme (6.5.3) contient les trois boucles suivantes :



(6.5.4)

b) Des parties irréductibles - ce qui reste d'un diagramme connexe lorsqu'on a coupé toutes les interactions disconnectantes et enlevé tous les colliers. Le diagramme (6.5.3) contient les cinq parties irréductibles suivantes :



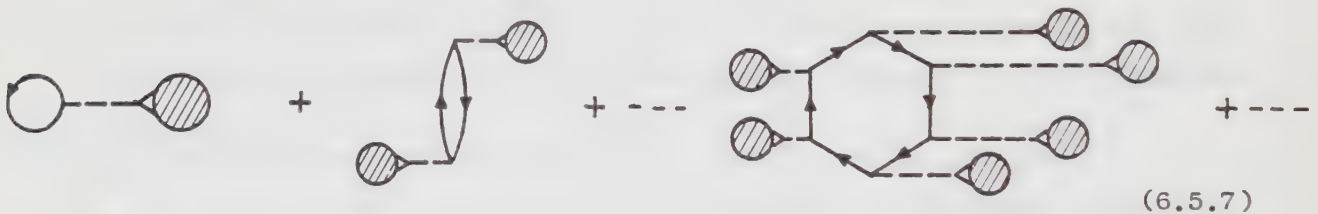
Tout diagramme se compose de n_v interactions disconnectées, n_c colliers et n_{pi} parties irréductibles. Les trois nombres sont reliés par la relation

$$1 = n_c + n_{pi} - n_v \quad . \quad (6.5.6)$$

On peut facilement démontrer cette relation topologique en partant d'un seul collier ($n_c = 1$, $n_{pi} = n_v$) et en ajoutant ensuite les autres colliers un à un. En ajoutant un collier avec b parties irréductibles, nous aurons donc $n_c + 1$ colliers, $n_{pi} + b$ parties irréductibles et $n_v + b + 1$ interactions disconnectantes. Les nombres n_v , n_c et n_{pi} sont des entiers positifs ou nuls.

On peut resommer les diagrammes connexes de trois façons différentes :

1) En resommant les colliers :



où $\text{---} \text{---} \text{---} \text{---}$ désigne l'ensemble des diagrammes qui peuvent être insérés sur une interaction disconnectante. La sommation des colliers se ramène au problème de l'énergie de l'état fondamental d'un système de fermions sans interaction dans un champ externe

$$W_{\alpha\gamma} = \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} = \sum_{\ell k} \langle \alpha k | v | \gamma \ell \rangle \rho_{\ell k} \quad . \quad (6.5.8)$$

Le potentiel externe total contient deux parties. D'abord, le champ créé par le potentiel à un corps (dû au coeur de $1,^{16}\text{O}$) $\epsilon_{ij}^{\delta} \delta_{ij}$ (la matrice de ce potentiel est diagonale dans la base sphérique) ou $\epsilon_{\alpha\beta}$ dans la base déformée. La deuxième partie contient le champ $W_{\alpha\gamma}$ (6.5.8) ressenti par une particule de valence.

Les valeurs propres E_{α} de la matrice

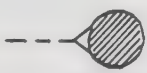
$$E_{\alpha\beta} = \epsilon_{\alpha\beta} + W_{\alpha\beta} \quad (6.5.9)$$

représentent les énergies des orbites des particules de valence dans un champ effectif qui consiste en un champ créé par le coeur de $1,^{16}\text{O}$ d'une part et du champ $W_{\alpha\gamma}$ d'autre part. L'énergie du fondamental est $\sum_{\alpha \text{ occ.}} E_{\alpha}$.

Dans la série (6.5.7) chaque diagramme $\mathcal{D}$ est compté $n_{\mathcal{D}}^{\mathcal{D}}$ fois et nous pouvons écrire :

$$\sum_{\mathcal{D}} n_{\mathcal{D}}^{\mathcal{D}} A(\mathcal{D}) = \sum_{\alpha \text{ occ.}} E_{\alpha} \quad (6.5.10)$$

La somme s'étend sur les états ayant l'énergie la plus basse.

2) En insérant l'ensemble des diagrammes  sur les deux bouts d'une ligne d'interaction disconnectante :

$$\text{Diagram showing two shaded circles connected by a dashed line.} \quad (6.5.11)$$

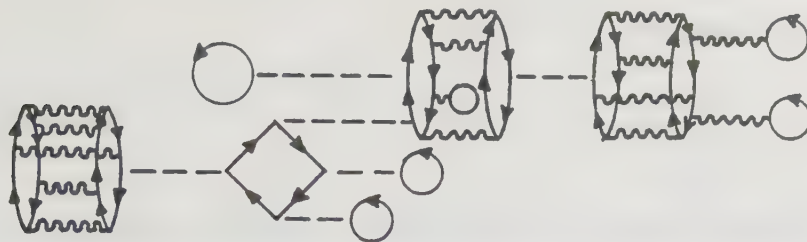
chacun des diagrammes de la série (6.5.11) est compté n_v fois. La contribution totale doit être divisée par 2 à cause de la symétrie :

$$\sum_{\mathcal{D}} n_{\mathcal{D}}^{\mathcal{D}} A(\mathcal{D}) = \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \langle ik | v | jl \rangle \rho_{ji} \rho_{lk} \quad (6.5.12)$$

3) En resommant tous les diagrammes de la partie irréductible, après avoir renormalisé tous les propagateurs :

$$\text{Diagram showing a double line with an arrow equals a single line with an arrow plus a diagram with a double line, an arrow, and a shaded circle.} \quad (6.5.13)$$

Notre somme des diagrammes connexes inclut les diagrammes tels que



(6.5.19)

L'expression pour l'énergie totale est la suivante :

$$E = \sum_{\alpha \text{ occ.}} E_{\alpha} - \frac{1}{2} \sum_{ijk\ell} \langle ik | v | j\ell \rangle \rho_{ji} \rho_{\ell k} - \sum_N \frac{|v_{ON}|^2}{E_N} \quad (6.5.20)$$

ou l'expression alternative :

$$E = \sum_{\alpha \text{ occ.}} E_{\alpha} - \frac{1}{2} \sum_{\alpha} E_{\alpha} \rho_{\alpha\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \rho_{\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha\beta} - \sum_N \frac{|v_{ON}|^2}{E_N}, \quad (6.5.21)$$

où

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = \sum_{j_1 j_2} \delta_{j_1 j_2} \varepsilon_{j_1} c_{j_1}^{\alpha} c_{j_2}^{\beta}. \quad (6.5.22)$$

6. Principe variationnel

Le théorème de C. Bloch nous donne la possibilité de surmonter les erreurs de surcomptage qui surgissent lorsqu'on calcule les diagrammes connexes avec les propagateurs habillés. Nous pouvons aussi prouver que l'énergie totale est stationnaire par rapport aux variations du champ statique. Il y aura une condition qui prescrira quelles insertions il faut mettre sur les propagateurs à un corps, si l'on veut que l'énergie totale calculée pour une certaine classe des diagrammes connexes soit stationnaire par rapport aux variations du champ statique à un corps $W_{\alpha\beta}$ (nous ne considérons que la partie instantanée de l'opérateur de masse). En effet, nous exigeons que lorsqu'on branche un faible champ extérieur, l'énergie totale du système soit stationnaire. Cette condition nous prescrit la façon de calculer le champ créé par les particules de valence. On retrouvera l'expression (6.5.8) pour le champ statique. Sous cette condition, l'énergie du système devient stationnaire par rapport aux variations des orbites dans le champ et par rapport aux va-

riations des énergies des orbitales en même temps.

Le champ vu par une particule est

$$W_{\alpha\gamma} = \sum_{k\ell} \langle \alpha k | v | \gamma \ell \rangle \rho_{\ell k} \quad . \quad (6.6.1)$$

Nous allons d'abord exprimer l'énergie totale avec l'aide du potentiel $W_{\alpha\gamma}$. L'expression de l'énergie totale en termes de matrice densité est la suivante :

$$E = \sum_{\alpha} E_{\alpha} - \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \rho_{\gamma\alpha} \langle \alpha\beta | v | \gamma\delta \rangle \rho_{\delta\beta} + D \quad , \quad (6.6.2)$$

D désignant la partie irréductible (6.5.18).

Pour des raisons de commodité, nous allons écrire sous forme matricielle :

$$\langle \alpha\beta | v | \gamma\delta \rangle \equiv V_{\alpha\gamma, \beta\delta} \quad . \quad (6.6.3)$$

Nous définissons la matrice hermitique V^{-1} :

$$\sum_{\beta\delta} V_{\alpha\gamma, \beta\delta} V_{\beta\delta, \epsilon\eta}^{-1} = \delta_{\alpha\epsilon} \delta_{\gamma\eta} \quad (6.6.4)$$

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \rho_{\gamma\alpha} V_{\alpha\gamma, \beta\delta} \rho_{\delta\beta} &= \sum_{\alpha', \beta'} \sum_{\rho\sigma} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \rho_{\sigma\rho} V_{\rho\sigma, \alpha'\beta'} V_{\alpha\gamma, \alpha'\beta'}^{-1} V_{\alpha\gamma, \beta\delta} \rho_{\delta\beta} \\ &= \sum_{\alpha', \beta'} \sum_{\alpha\gamma} W_{\alpha'\beta'} V_{\alpha\gamma, \alpha'\beta'}^{-1} W_{\alpha\gamma} \quad , \end{aligned} \quad (6.6.5)$$

d'où :

$$E = \sum_{\alpha \text{ occ.}} E_{\alpha} - \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} W_{\alpha\gamma} V_{\alpha\gamma, \beta\delta}^{-1} W_{\beta\delta} + D \quad (6.6.6)$$

Nous allons considérer E comme une fonctionnelle du potentiel W.

$$\delta E[W] = \sum_{\rho\sigma} \rho_{\sigma}^0 \delta W_{\rho\sigma} - \sum_{\alpha\gamma, \rho\sigma} W_{\alpha\gamma} V_{\alpha\gamma, \rho\sigma}^{-1} \delta W_{\rho\sigma} + \sum_{\rho\sigma} \frac{\delta D[W]}{\delta W_{\rho\sigma}} \delta W_{\rho\sigma} \quad . \quad (6.6.7)$$

La matrice ρ^0 est définie ainsi :

$$\rho_{\alpha\beta}^0 = \begin{cases} \delta_{\alpha\beta} & \text{pour } \alpha \text{ occupé} \\ 0 & \text{autrement} \end{cases} \quad (6.6.8)$$

La condition qui rend l'énergie stationnaire est donc :

$$\delta E[W] = \sum_{\rho\sigma} \left\{ \rho_{\sigma}^0 - \sum_{\alpha\gamma} w_{\alpha\gamma} v_{\alpha\gamma,\rho\sigma}^{-1} + \frac{\delta D[W]}{\delta w_{\rho\sigma}} \right\} \delta w_{\rho\sigma} = 0 \quad (6.6.9)$$

Elle est donnée par le système des équations :

$$\rho_{\sigma}^0 - \sum_{\alpha\gamma} w_{\alpha\gamma} v_{\alpha\gamma,\rho\sigma}^{-1} + \frac{\delta D[W]}{\delta w_{\rho\sigma}} = 0 \quad (6.6.10)$$

Nous multiplions chaque équation par $v_{\beta\delta,\rho\sigma}$ et, en les sommant par ρ et σ , nous obtenons :

$$\begin{aligned} \sum_{\rho\sigma} \rho_{\sigma}^0 v_{\beta\delta,\rho\sigma} - \sum_{\alpha\gamma} \sum_{\rho\sigma} w_{\alpha\gamma} v_{\alpha\gamma,\rho\sigma}^{-1} v_{\beta\delta,\rho\sigma} + \sum_{\rho\sigma} v_{\beta\delta,\rho\sigma} \frac{\delta D[W]}{\delta w_{\rho\sigma}} \\ = \sum_{\rho\sigma} \rho_{\sigma} v_{\beta\delta,\rho\sigma} - w_{\beta\delta} + \sum_{\rho\sigma} v_{\beta\delta,\rho\sigma} \frac{\delta D[W]}{\delta w_{\rho\sigma}} = 0 \end{aligned} \quad (6.6.11)$$

La condition qui rend l'énergie stationnaire nous définit le potentiel externe W :

$$w_{\beta\delta} = \sum_{\rho\sigma} \left[\rho_{\sigma} v_{\beta\delta,\rho\sigma} + \frac{\delta D[W]}{\delta w_{\rho\sigma}} v_{\beta\delta,\rho\sigma} \right] \quad (6.6.12)$$

Il nous reste à calculer $\frac{\delta D[W]}{\delta w}$, viz. la dérivée fonctionnelle de la partie irréductible D par rapport ρ_{σ} aux variations du potentiel W :

$$D = \sum_{I,K} v_{OI} \langle I | \frac{1}{E_O - H_O} | K \rangle v_{KO} + \sum_{I,J,K,L} v_{OI} \langle I | \frac{1}{E_O - H_O} | J \rangle v_{JK} \langle K | \frac{1}{E_O - H_O} | L \rangle v_{LO} + \dots, \quad (6.6.13)$$

où H_O est défini ainsi (conformément aux équations (3.1.4) et (3.1.5)) :

$$H_O = \sum_{\lambda\mu} e_{\lambda\mu} : b_{\lambda}^{\dagger} b_{\mu} : = \sum_{\lambda\mu} (\varepsilon_{\lambda\mu} + w_{\lambda\mu}) : b_{\lambda}^{\dagger} b_{\mu} : \quad (6.6.14)$$

Nous allons d'abord considérer la variation de l'expression :

$$\mathcal{E} \equiv V_{IJ} \langle J | \frac{1}{E_O - H_O} | K \rangle V_{KL} \quad (6.6.15)$$

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{E} &= \delta \left\{ V_{IJ} \langle J | \frac{1}{E_O - H_O} | K \rangle V_{KL} \right\} = \\ &= V_{IJ} \langle J | \frac{1}{E_O - H_O - \delta W} | K \rangle V_{KL} - V_{IJ} \langle J | \frac{1}{E_O - H_O} | K \rangle V_{KL} \sum_{\alpha\beta} \delta W_{\alpha\beta} a_{\alpha}^{+} a_{\beta} \\ &= V_{IJ} \langle J | \frac{\delta W}{(E_O - H_O - \delta W)(E_O - H_O)} | K \rangle V_{KL} = V_{IJ} \langle J | \frac{\sum_{\alpha\beta} \delta W_{\alpha\beta} a_{\alpha}^{+} a_{\beta}}{(E_O - H_O - \delta W)(E_O - H_O)} | K \rangle V_{KL} \end{aligned} \quad (6.6.16)$$

$$\lim_{\delta W_{\gamma\delta} \rightarrow 0} \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta W_{\gamma\delta}} = V_{IJ} \langle J | \frac{a_{\gamma}^{+} a_{\delta}}{(E_O - H_O)(E_O - H_O)} | K \rangle V_{KL} \quad (6.6.17)$$

Dans la représentation qui diagonalise la matrice de l'opérateur H_O :

$$\lim_{\delta W_{\gamma\delta} \rightarrow 0} \frac{\delta \mathcal{E}}{\delta W_{\gamma\delta}} = V_{IJ} \frac{1}{E_O - E_J} \langle J | a_{\gamma}^{+} a_{\delta} | K \rangle \frac{1}{E_O - E_K} V_{KL} \quad (6.6.18)$$

Il est facile de voir que la dérivée fonctionnelle de la partie irréductible D par rapport au champ W est donnée par l'expression

$$\frac{\delta D}{\delta W_{\gamma\delta}} = \sum_{I,J,K,L} V_{OI} G_{IJ}(E_O) \langle J | a_{\gamma}^{+} a_{\delta} | K \rangle G_{KL}(E_O) V_{LO} \equiv \rho_{\gamma\delta}^1 \quad (6.6.19)$$

qui est égale à l'équation (6.4.6) :

$$\rho_{\gamma\delta}^1 = \text{diagram} \quad (6.6.20)$$

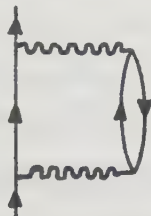
La condition rendant l'énergie stationnaire nous permet de calculer les énergies des orbitales :

$$E_{\alpha\gamma} = \epsilon_{\alpha\gamma} + \sum_{\rho\sigma} \langle \alpha\rho | v | \gamma\sigma \rangle \{ \rho_{\sigma\rho}^0 + \rho_{\sigma\rho}^1 \} \quad (6.6.21)$$

Nous retrouvons donc la relation (6.5.9). Ainsi lorsque l'équation (6.6.21) est satisfaite, l'équation (6.6.6) de l'énergie est la même que les équations

tions (6.5.20) et (6.5.21) obtenues par la sommation de diagrammes. En outre nous avons démontré que l'énergie est stationnaire.

On pourrait se demander pourquoi on n'a pas renormalisé le propagateur à un corps par le diagramme tel que :



(6.6.22)

qui représente la contribution des excitations à une particule et un trou au propagateur à un corps, alors qu'on a inclus les excitations à deux particules et deux trous.

A l'ordre le plus bas, la contribution à l'énergie du fondamental résultant de la renormalisation du propagateur par le diagramme (6.6.22) s'exprime par le diagramme :



(6.6.23)

(Selon la prescription^[4], il faut rejoindre les deux lignes extérieures du diagramme (6.6.22) pour en faire un diagramme connexe contribuant à l'énergie du système pair-pair.)

Or le diagramme (6.6.23) est déjà inclus dans notre expression pour l'énergie du fondamental.

Le diagramme (6.6.22) est particulier à l'énergie du système pair-impair, c'est-à-dire du noyau ayant un nucléon en plus.

CHAPITRE 7

RESULTATS DES CALCULS NUMERIQUES

Les calculs numériques ont été effectués pour les noyaux pair-pairs $N=Z$ appartenant à la couche 2s-1d à savoir le ^{20}Ne , ^{24}Mg , ^{28}Si , ^{32}S , ^{36}Ar . Les fonctions d'onde ont toujours soit la symétrie axiale, soit la symétrie sphérique.

Pour chaque noyau, deux calculs ont été effectués : celui correspondant à la méthode variationnelle incluant les corrélations à deux particules et deux trous et décrite dans le Chapitre 6 ; d'autre part on a aussi refait le calcul de Hartree-Fock et calculé les corrélations à 2p-2t avec les orbitales de Hartree-Fock, cela afin de pouvoir comparer directement les résultats des deux méthodes. Les paramètres utilisés sont les mêmes que ceux qui sont utilisés dans le Chapitre 5.

En général, la procédure de Hartree-Fock dans une seule couche majeure est rapidement convergente, souvent trois ou quatre itérations suffisent pour atteindre la solution de Hartree-Fock à partir des orbitales de Nilsson.

La convergence de la procédure variationnelle incluant les corrélations est moins bonne. Dans la plupart des cas, il fallait au moins dix itérations pour atteindre la solution.

Le calcul self-consistent avec les corrélations à 2p-2t décrit dans le Chapitre 6, ainsi que le calcul de Hartree-Fock ne sont que des approximations à la diagonalisation exacte des configurations appartenant à la couche 2s-1d. Si on incluait toutes les configurations dans une procédure variationnelle, les résultats seraient invariants par rapport aux changements des orbitales et la procédure ne convergerait plus. Or, en incluant les corrélations à deux particules et deux trous, nous avons élargi l'espace des configurations, de sorte que les variations des orbitales à chaque itération changent moins les quantités calculées, en particulier l'énergie et par conséquent la convergence est plus lente.

La procédure décrite dans le Chapitre 6 étant basée sur la théorie

des perturbations, il est évident qu'elle sera divergente dans le cas où l'énergie du premier état excité s'approche beaucoup de l'énergie d'état fondamental. C'est le cas des solutions déformées du ^{32}S .

Dans la discussion des résultats numériques, nous désignons par "2p-2t" les résultats du calcul self-consistent avec les corrélations à 2p-2t décrit dans le Chapitre 6. Nous désignons par H.F. le calcul de Hartree-Fock et des corrélations à 2p-2t calculées avec les orbites de H.F. .

Les tableaux 3-7 donnent l'énergie E_λ et les composantes des orbites déformées sur les états $j\pi$ de la couche 2s-1d, pour divers noyaux. Le tableau 8 donne les énergies des orbites pour les solutions sphériques, la fonction d'onde de l'orbite s'identifiant dans ce cas aux fonctions de base $j\pi$.

Les tableaux 9-15 donnent les matrices densités exprimées dans la base des orbites déformées. On peut obtenir la matrice densité dans la base $j\pi$ en utilisant les tableaux 3-7 qui donnent les orbites déformées.

Le tableau 16 donne le niveau de Fermi, qui est l'énergie de l'orbite occupée la plus haute, la lacune en énergie qui est la différence entre l'énergie de l'orbite vide la plus basse et le niveau de Fermi, et l'énergie de l'état excité à 2p-2t le plus bas.

Le tableau 17 donne l'énergie de l'état fondamental du noyau pair-pair et l'intensité de certaines configurations à 2p-2t dans le fondamental. On a séparé deux contributions à l'énergie E_{TOT} du fondamental: l'énergie E_{HF} définie par

$$E_{\text{HF}} = \sum_{\alpha} E_{\alpha} - \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \langle ij|v|kl \rangle \rho_{ki} \rho_{lj}$$

qui correspond à l'énergie de l'état de Hartree-Fock pour le calcul de Hartree-Fock et à la contribution (6.5.10) des diagrammes en collier avec la contribution (6.5.12) pour le calcul "2p-2t"; d'autre part l'énergie ΔE qui correspond à la contribution (6.5.14) du diagramme irréductible. On a $E_{\text{TOT}} = E_{\text{HF}} + \Delta E$.

Les intensités S sont définies dans la légende du tableau 17.

Le tableau 18 donne les moments quadrupolaires des états déformés.

1. Niveau de Fermi, lacune en énergie et énergie du premier état excité

Ces quantités sont données dans le tableau 16. Nous nous apercevons que pour les noyaux ^{20}Ne , ^{28}Si , ^{36}Ar la lacune en énergie calculée dans le calcul de Hartree-Fock est plus grande que celle que l'on obtient dans le calcul "2p-2t". Cela peut s'expliquer de la façon suivante : la lacune en énergie est dominée par la composante Majorana dans la partie monopole de la force ^{[6][18]}. Cela reflète la symétrie par rapport aux permutations des orbites des particules. Autrement dit, l'énergie d'une orbite est toujours abaissée d'une énergie proportionnelle au nombre de nucléons occupant la même orbite spatiale. Le mélange des configurations à 2p-2t diminue le nombre d'occupation des états trous occupés (voir les tableaux 9-15) et relève donc l'énergie des orbites trous. Le même mélange des configurations donne des nombres d'occupation non nuls pour les orbites vides et donc abaisse l'énergie des orbites de particule. Il en résulte une diminution de la lacune en énergie entre les orbites vides et occupées et un abaissement correspondant de l'énergie du premier état excité à 2p-2t .

Pour le ^{28}Si (la solution sphérique) le premier état excité se trouve trop bas par rapport au niveau observé à 6,69 MeV ^[21].

Pour le ^{24}Mg la lacune en énergie obtenue par le calcul "2p-2t" est plus grande que la lacune en énergie obtenue par le calcul de Hartree-Fock. Il faut rappeler que la solution axiale du calcul de Hartree-Fock n'est pas la solution la plus basse en énergie ^[6]. La solution ellipsoïdale du ^{24}Mg , qui est obtenue à partir du ^{20}Ne en plaçant les quatre nucléons supplémentaires dans l'orbite $(d_{1/2}-d_{3/2})/\sqrt{2}$, a une énergie plus basse et une plus grande lacune en énergie que la solution axiale. Cela vient du fait que la solution ellipsoïdale ayant quatre nucléons dans chaque orbite spatiale possède une plus grande symétrie spatiale. L'énergie potentielle de la force de Rosenfeld, qui a une composante de Majorana favorise les fonctions d'onde ayant un maximum de symétrie spatiale. En l'absence de l'interaction spin-orbite, la fonction d'onde de la solution axiale devient une fonction d'onde L-S avec $S=0$. L'interaction spin-orbite affecte peu l'énergie du ^{24}Mg .

L'augmentation de la lacune en énergie pour le ^{24}Mg due aux corrélations suggère l'effet d'une déformation non-axiale $\Delta K=2$ dans la fonction d'onde du fondamental. Elle y apparaît projetée sur l'espace $K=0$, sous la

forme d'un mélange à 2p-2t . Les projections ne changent pas la symétrie par rapport aux permutations des particules. Il en résulte aussi une petite augmentation d'énergie du premier état excité.

Un effet analogue se produit dans le ^{32}S pour la solution ayant la symétrie sphérique, les solutions axiales n'étant pas stables. Le mélange des configurations à 2p-2t reproduit la projection $J=0$ d'un état ayant une déformation triaxiale avec une plus grande symétrie spatiale. L'énergie du premier état excité monte de 4,93 MeV à 5,05 MeV , la valeur expérimentale du premier état excité étant 3,7 MeV . Le fait que la solution sphérique du ^{32}S résultant de la procédure généralisée est la seule solution stable est encourageant, car la forme sphérique pour le ^{32}S est conforme aux prédictions expérimentales^[12].

2. Energies des états fondamentaux

Les énergies des états fondamentaux sont tabulées dans le tableau 17 .

^{20}Ne Les résultats du calcul "2p-2t" sont très semblables à ceux du calcul H.F.

^{24}Mg Le gain en énergie résultant du calcul "2p-2t" par rapport à la solution axiale résultant du calcul de Hartree-Fock est égal à

$$E_{\text{HF}} - E_{\text{TOT}}("2p-2t") = - 73,17 \text{ MeV} + 76,97 \text{ MeV} = 3,80 \text{ MeV} \quad .$$

Le gain en énergie de la solution H.F. non-axiale par rapport à la solution H.F. axiale^[18] est égal à 3,82 MeV . Le gain qui vient de la projection sur $K=0$ de la solution H.F. non-axiale est environ 0,7 MeV . Si on estime grossièrement le gain en énergie dû au mélange des configurations à 2p-2t pour la solution non-axiale à $\sim 0,3$ MeV , la solution non-axiale avec les corrélations à 2p-2t incluses serait toujours ~ 1 MeV plus basse que la solution axiale avec les corrélations. Goodman, Struble et Goswami^[3], calculant les corrélations dues à l'appariement du type $T=0$ sur la base de Hartree-Fock sont arrivés à la conclusion que l'appariement du type $T=0$ restaurerait la symétrie axiale. Selon nos calculs et nos estimations, cela ne semble pas être le cas. Goodman, Struble et Goswami n'ont pas éliminé les états parasites dus à la non-conservation du moment cinétique et le gain en énergie obtenu par leur calcul est sûrement surestimé. D'autre part, en ce qui concerne l'importance

d'appariement de type $T=0$, leur hypothèse nous paraît justifiée, les corrélations à deux particules et deux trous de tel type emportant 0,284 sur 0,427 de l'intensité totale des corrélations à deux particules et deux trous dans ^{24}Mg . L'intensité des corrélations des paires de particules et de trous couplées à $T=0$ dans les autres noyaux est négligeable par rapport aux intensités totales respectives.

^{28}Si Avec le calcul "2p-2t" l'énergie totale de la solution sphérique est de 6,42 MeV plus basse que la solution sphérique rendue par l'approximation de Hartree-Fock. Néanmoins, la solution de la forme aplatie reste toujours la plus basse en énergie. Pour les deux solutions axiales, le gain en énergie dû aux corrélations à 2p-2t est très petit, les lacunes en énergie de ces deux solutions restant considérables même en incluant les corrélations à 2p-2t. En ce qui concerne la déformation d'équilibre, le calcul "2p-2t" ne favorise pas une des solutions axiales de façon appréciable.

^{32}S La solution sphérique est la seule solution stable du calcul "2p-2t" L'énergie d'état fondamental est abaissée de 4,71 MeV par rapport à l'énergie de l'état de Hartree-Fock de symétrie sphérique. L'énergie du premier état excité est à 5,05 MeV, tandis que l'énergie du premier état excité donnée par l'expérience est à 3,7 MeV [21]

^{36}Ar Les résultats du calcul "2p-2t" ne changent pratiquement pas par rapport aux résultats obtenus avec l'approximation de Hartree-Fock.

3 . Les moments quadrupolaires

Les moments quadrupolaires sont tabulés dans le tableau 18. Les corrélations à 2p-2t abaissent les valeurs des moments quadrupolaires d'environ 10% dans tous les noyaux ayant la déformation statique. Cela diminue les transitions BE2 de 20%.

CONCLUSION

Quand on considère les diverses tentatives d'améliorer les fonctions d'onde de la théorie de Hartree-Fock, on est frappé par les propriétés particulières des noyaux pair-pairs $N=Z$. Ces noyaux sont stables par rapport aux corrélations de type BCS. L'interaction modèle "pairing + quadrupole" qui réussit si bien à décrire les fonctions d'onde et les déformations des noyaux lourds qui ont un excès de neutrons est inapplicable aux noyaux pair-pairs $N=Z$. Le fait que dans ces noyaux les neutrons et les protons occupent les mêmes orbites permet à la fonction d'onde de rechercher dans un calcul variationnel le maximum de symétrie spatiale par rapport aux permutations des nucléons. Cette symétrie est due à la partie Majorana dans la composante monopole de la force (composante à portée infinie). Dans ces noyaux la déformation du champ moyen est aussi produite par la composante quadrupole-quadrupole de la force de sorte que la force modèle pour ces noyaux est une force "monopole + quadrupole". [6].

C'est cette force modèle qui est diagonalisée par les fonctions d'onde SU_3 de Elliott. Les déviations de ce modèle sont dues d'une part à l'action de la force spin-orbite sur le champ moyen et d'autre part à un mélange des configurations qui n'est pas dû à une force d'appariement, comme le montrent nos calculs.

Nous avons donc été amenés à formuler une théorie self-consistante du champ moyen en présence de toutes les configurations à deux particules et deux trous. En outre, nous avons fait une application numérique complète de cette théorie dans la couche 2s-1d. Nous pensons que ce n'est là qu'une première application de cette théorie. Il nous paraît beaucoup moins certain que les résultats obtenus dépendent aussi peu des forces effectives que les résultats des calculs de Hartree-Fock dans la couche 2s-1d. Il y a en outre beaucoup d'autres applications à la structure des noyaux. Par exemple il serait très souhaitable de calculer les corrélations dues à l'excitation des nucléons de la couche 2s-1d à la couche 2p-1f et de la couche 1p à la couche 2s-1d. D'autre part cette théorie trouve son application dans les calculs microscopiques faits avec une force effective ayant une partie répulsive non infinie (cœur mou) dans lesquels on est obligé d'ajouter les configurations à 2p-2t.

Dans toutes les applications il est indispensable de bien traiter le problème des effets parasites dus au mouvement du centre de masse. C'est là une difficulté majeure pour laquelle il serait souhaitable de développer de bonnes approximations.

REFERENCES

- [1] - S.G. NILSSON - Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selk. 29, 16 (1955)
- [2] - A. MESSIAH - Quantum Mechanics, North-Holland Publishing Co., Amsterdam (1961) and Dunod, Paris 1959.
- [3] - A. GOSWAMI and L.S. KISSLINGER - Phys. Rev. 140, B26 (1965)
- H.T. CHEN and A. GOSWAMI - Phys. Letters 24B, 257 (1967)
- A.L. GOODMAN, G.L. STRUBLE and A. GOSWAMI - Phys. Rev. Letters 26B, 260 (1968)
- [4] - D.J. THOULESS - The Quantum Mechanics of Many-Body Systems, Academic Press, New York and London 1961.
- [5] - D.L. HILL and J.A. WHEELER - Phys. Rev. 89, 1106 (1953)
- [6] - G. RIPKA - Advances in Nucl. Phys. 1, Plenum Press, 1968.
- [7] - A. BOHR and B. MOTTELSON - Dan. Mat. Fys. Medd. 27, n°16 (1953)
- [8] - T.H.R. SKYRME - Proc. Phys. Soc.(London) A70, 433 (1957)
- [9] - C.A. LEVINSON - Phys. Rev. 132, 2184 (1963)
- [10] - G. RIPKA and R. PADJEN - Pairing Vibrations and Two Particle-Two Hole Admixtures (Cours Trieste), Saclay preprint, Mai 1969, DPh-T/69-13
- R. PADJEN and G. RIPKA - Phys. Letters 29B, 548 (1969)
- [11] - I. KELSON - Phys. Rev. 132, 2189 (1963)
- [12] - G. RIPKA - Third Symposium on the Structure of Low-Medium Mass Nuclei, University Press of Kansas, Lawrence and London, 1968.
- [13] - M.C. MERMAZ, G.E. HOLLAND, C.A. WHITTEN Jr., D.A. BROMLEY - Proceedings of the International Conference on Nuclear Structure, Tokyo 1967 ;
Suppl. J. Phys. Soc. Japan 24 (1968)
- [14] - L. SALPATHY, D. GOSS and M.K. BANERJEE - Phys. Rev. 183, 887 (1969)
- J. PRADAL - Thèse, Faculté des Sciences d'Orsay 1965.
- [15] - M.K. PAL and A.P. STAMP - Nucl. Phys. A99, 228 (1967)
- [16] - A.P. STAMP - Phys. Letters 26B, 58 (1967)
- [17] - R. HOFSTADTER - Electron Scattering and Nuclear and Nucleon Structure, W.A. Benjamin, New York, 1963.

- [18] - G. RIPKA - Lectures delivered at the Institute of Theoretical Physics in Trieste, IAEA, 1966.
- G. RIPKA - Thèse, Faculté des Sciences d'Orsay, 1967.
- [19] - V. GILLET, E. SANDERSON - Nucl. Phys. 31, 292 (1967)
- [20] - C. BLOCH - Physica 26, Congress on Many Particles Problem, Utrecht, S62-74
Studies in Statistical Mechanics, Vol.III, J. de Boer et G.E. Uhlenbeck,
North-Holland, 1965, Amsterdam.
- R. BALIAN, C. BLOCH, C. DE DOMINICIS - Nucl. Phys. 25, 529 (1961)
- Nucl. Phys. 27, 294 (1961)
- [21] - E.C. HALBERT - Third Symposium on the Structure of Low-Medium Mass Nuclei,
University Press of Kansas, Lawrence and London, 1968.
- [22] - S.J. KRIEGER - Hartree-Fock Calculations of Even-Even $N=Z$ Nuclei
(to be published in Phys. Rev.)
- [23] - S.K.M. WONG, J. LE TOURNEUX, N. QUANG-HOC and G. SAUMIER -
Hartree-Fock Calculations in the s-d Shell with Realistic and Semi-
Realistic Interactions, Université de Montréal, Département de Physique,
Preprint LPN-UM-32, 1969.
- [24] - R. LOMBARD - Thèse, Faculté des Sciences d'Orsay, 1964.
- [25] - R. PADJEN, G. RIPKA - Proceedings of the International Conference on
Nuclear Structure, Tokyo 1967.
- [26] - G. RIPKA - Ecole d'Eté de Physique Théorique, Les Houches 1968,
Gordon and Breach Science Publishers, New York, London, Paris.

Manuscrit reçu le 1er avril 1969

LEGENDE DES TABLEAUX

Tableau 1 - Rayons quadratiques moyens de la distribution de charge de divers noyaux obtenus par la diffusion d'électrons^[17] et la valeur de la constante de l'oscillateur harmonique $\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ (en Fermis) qui donne la valeur expérimentale du rayon avec une fonction d'onde où chaque orbite appartient à une couche majeure.

Tableau 2 - Valeurs de la constante α de l'oscillateur harmonique et des énergies ε_j de la couche 2s-1d utilisées dans les calculs dans une couche majeure avec une force de Rosenfeld. Les valeurs de α pour le ^{20}Ne et ^{36}Ar sont extrapolées à partir des valeurs des noyaux voisins données par le Tableau 1 .

Tableaux 3 - 7 - Les solutions à symétrie axiale

Les nombres dans la troisième colonne sont les énergies E_λ des orbites de Hartree-Fock (celles indiquées par H.F.) et les énergies des orbites dans le champ moyen incluant les corrélations à 2p-2t (celles indiquées par "2p-2t"). L'énergie de chaque orbite est suivie de ses composantes C_j^λ . Chaque ligne correspond à une orbite déformée. Les astérisques dénotent les orbites occupées. Les énergies sont exprimées en MeV .

Tableau 8 - Solutions sphériques

Les énergies des orbites de Hartree-Fock (H.F.) et des orbites résultant du calcul "2p-2t" des solutions sphériques du ^{28}Si et du ^{32}S . L'astérisque désigne les couches occupées. Les énergies sont exprimées en MeV .

Tableaux 9 - 15 - Les matrices densités de l'état fondamental des noyaux pair-pairs

Les matrices densités sont présentées dans la base déformée. La base déformée pour chacune des solutions considérées est donnée dans les Tableaux 3 - 7 par les composantes C_j^λ .

Tableau 16

- Le niveau de Fermi (l'énergie de l'orbite occupée la plus haute), la lacune en énergie entre le niveau de Fermi et l'orbite vide la plus basse et l'énergie du premier état excité obtenus par les calculs de Hartree-Fock (H.F.) et par le calcul variationnel "2p-2t". Les énergies sont exprimées dans les unités MeV .

Tableau 17

- Les énergies du fondamental des noyaux pair-pairs. On distingue l'énergie E_{HF} et le gain en énergie ΔE dû aux corrélations à deux particules et deux trous contribuant tous les deux à l'énergie totale E_{TOT} . Les intensités du mélange des configurations à 2p-2t au fondamental obtenues par le calcul "2p-2t" S_{00} , S_{01} , S_{10} et S_{11} sont la somme des intensités des configurations à 2p-2t suivantes :

$$S_{00} \rightarrow |ij T=0 ; \alpha\beta T=0\rangle \quad i \neq j, j \neq i ; \alpha \neq \beta, \beta \neq \alpha$$

$$S_{01} \rightarrow |i\tilde{i} T=0 ; \alpha\tilde{\alpha} T=0\rangle$$

$$S_{10} \rightarrow |ij T=1 ; \alpha\beta T=1\rangle \quad i \neq j, j \neq i ; \alpha \neq \beta, \beta \neq \alpha$$

$$S_{11} \rightarrow |i\tilde{i} T=1 ; \alpha\tilde{\alpha} T=1\rangle$$

S_{TOT} désigne l'intensité totale. Les énergies sont exprimées en MeV .

Tableau 18

- Les moments quadrupolaires obtenus par le calcul de Hartree-Fock (H.F.) et par le calcul "2p-2t". Pour obtenir le moment quadrupolaire de charge, les nombres tabulés doivent être multipliés par deux et pour obtenir le moment quadrupolaire de masse, il faut les multiplier par quatre. Les moments quadrupolaires sont exprimés en unités de $\text{fm}^2 = 0,01 \text{ barn}$.

TABLEAU 1

Noyau	Rayon quadratique moyen	α
^4He	1,62	0,756
^{12}C	2,37	0,620
^{16}O	2,64	0,568
^{24}Mg	2,98	0,547
^{28}Si	3,04	0,548
^{32}S	3,19	0,531
^{40}Ca	3,52	0,492

TABLEAU 2

Noyau	α	$\varepsilon_{d_{5/2}}$	$\varepsilon_{s_{1/2}}$	$\varepsilon_{d_{3/2}}$
^{16}O	0,568	- 4,14	- 3,27	0,93
^{20}Ne	0,559	- 4,38	- 3,26	0,79
^{24}Mg	0,547	- 4,71	- 3,26	0,61
^{28}Si	0,548	- 4,68	- 3,26	0,62
^{32}S	0,531	- 5,14	- 3,25	0,36
^{36}Ar	0,496	- 6,09	- 3,22	- 0,19
^{40}Ca	0,492	- 6,19	- 3,22	- 0,25

TABLEAU 3

 $^{20}\text{Ne}_{\text{all.}}$

		E_{λ}	$d_{-3/2}^{5/2}$	$d_{1/2}^{5/2}$	$d_{5/2}^{5/2}$	$s_{1/2}^{1/2}$	$d_{1/2}^{3/2}$	$d_{-3/2}^{3/2}$
1*	H.F.	- 14,65		- 0,754		0,534	0,384	
	"2p-2t"	- 14,34		- 0,756		0,534	0,379	
2	H.F.	- 6,60	0,993					0,119
	"2p-2t"	- 6,61	0,994					0,114
3	H.F.	- 5,22		- 0,641		- 0,725	- 0,251	
	"2p-2t"	- 5,31		- 0,636		- 0,737	- 0,230	
4	H.F.	- 5,12			1,0			
	"2p-2t"	- 5,21			1,0			
5	H.F.	- 2,37		- 0,144		0,435	- 0,889	
	"2p-2t"	- 2,40		- 0,157		0,415	- 0,897	
6	H.F.	- 0,246	0,119					- 0,993
	"2p-2t"	- 0,33	0,114					- 0,994

TABLEAU 4

 $^{24}\text{Mg}_{\text{all.}}$

		E_{λ}	$d_{-3/2}^{5/2}$	$d_{1/2}^{5/2}$	$d_{5/2}^{5/2}$	$s_{1/2}^{1/2}$	$d_{1/2}^{3/2}$	$d_{-3/2}^{3/2}$
1*	H.F.	- 16,33		- 0,789		0,547	0,280	
	"2p-2t"	- 15,96		- 0,788		0,556	0,265	
2*	H.F.	- 11,99	0,971					0,241
	"2p-2t"	- 12,05	0,973					0,232
3	H.F.	- 9,86		- 0,545		- 0,412	- 0,730	
	"2p-2t"	- 9,57		- 0,555		- 0,457	- 0,695	
4	H.F.	- 7,52			1,0			
	"2p-2t"	- 7,79			1,0			
5	H.F.	- 4,91		0,284		0,729	- 0,623	
	"2p-2t"	- 5,15		0,265		0,695	- 0,668	
6	H.F.	- 3,00	0,241					- 0,971
	"2p-2t"	- 3,09	0,232					- 0,973

TABLEAU 5

 $^{28}\text{Si}_{\text{all.}}$

		E_{λ}	$d_{-3/2}^{5/2}$	$d_{1/2}^{5/2}$	$d_{5/2}^{5/2}$	$s_{1/2}^{1/2}$	$d_{1/2}^{3/2}$	$d_{-3/2}^{3/2}$
1*	H.F.	- 19,48		- 0,777		0,617	0,122	
	"2p-2t"	- 18,82		- 0,777		0,617	0,125	
2*	H.F.	- 17,61	0,953					0,303
	"2p-2t"	- 16,94	0,958					0,286
3*	H.F.	- 14,75		- 0,456		- 0,419	- 0,785	
	"2p-2t"	- 14,16		- 0,475		- 0,443	- 0,761	
4	H.F.	- 9,29			1,0			
	"2p-2t"	- 9,92						
5	H.F.	- 6,52		0,434		0,666	- 0,607	
	"2p-2t"	- 7,15		0,414		0,650	- 0,637	
6	H.F.	- 4,72	0,303					- 0,953
	"2p-2t"	- 5,37	0,286					- 0,958

TABLEAU 6

 $^{28}\text{Si}_{\text{apl.}}$

		E_{λ}	$d_{-3/2}^{5/2}$	$d_{1/2}^{5/2}$	$d_{5/2}^{5/2}$	$s_{1/2}^{1/2}$	$d_{1/2}^{3/2}$	$d_{-3/2}^{3/2}$
1*	H.F.	- 18,62			1,0			
	"2p-2t"	- 18,06			1,0			
2*	H.F.	- 18,07		- 0,578		- 0,760	0,298	
	"2p-2t"	- 17,61		- 0,578		- 0,765	0,284	
3*	H.F.	- 15,06	- 0,692					0,722
	"2p-2t"	- 14,66	- 0,727					0,686
4	H.F.	- 8,35	0,722					0,692
	"2p-2t"	- 8,77	0,686					0,727
5	H.F.	- 8,13		0,805		- 0,469	0,364	
	"2p-2t"	- 8,67		0,802		- 0,468	0,371	
6	H.F.	- 4,12		0,137		- 0,450	- 0,882	
	"2p-2t"	- 4,59		0,151		- 0,442	- 0,884	

TABLEAU 7

 $^{36}\text{Ar}_{\text{apl.}}$

		E_{λ}	$d_{-3/2}^{5/2}$	$d_{1/2}^{5/2}$	$d_{5/2}^{5/2}$	$s_{1/2}^{1/2}$	$d_{1/2}^{3/2}$	$d_{-3/2}^{3/2}$
1*	H.F.	- 21,02			1,0			
	"2p-2t"	- 20,88			1,0			
2*	H.F.	- 19,87	- 0,994					0,110
	"2p-2t"	- 19,79	- 0,995					0,104
3*	H.F.	- 18,88		0,806		0,587	0,080	
	"2p-2t"	- 18,82		0,818		0,569	0,082	
4*	H.F.	- 15,90		- 0,437		0,681	- 0,588	
	"2p-2t"	- 15,89		- 0,434		0,704	- 0,562	
5*	H.F.	- 14,84	0,110					0,994
	"2p-2t"	- 14,73	0,104					0,995
6	H.F.	- 10,17		0,400		- 0,439	- 0,805	
	"2p-2t"	- 10,57		0,378		- 0,424	- 0,823	

TABLEAU 8

Orbite \ Noyau		^{28}Si	^{32}S
$1d_{3/2}$	H.F.	- 10,18	- 11,65
	"2p-2t"	- 9,69	- 11,56
$2s_{1/2}$	H.F.	- 8,96	- 17,08*
	"2p-2t"	- 10,18	- 16,88*
$1d_{5/2}$	H.F.	- 14,41*	- 16,19*
	"2p-2t"	- 14,31*	- 16,32*

TABLEAU 9

 ^{20}Ne

Orbite N°	1	2	3	4	5	6
1	0,971					
2		0,003				0,001
3			0,010		- 0,006	
4				0,005		
5			- 0,006		0,007	
6		0,001				0,004

TABLEAU 10

 ^{24}Mg

Orbite N°	1	2	3	4	5	6
1	0,937					
2		0,636				
3			0,336		0,065	
4				0,028		
5			0,065		0,033	
6						0,03

TABLEAU 11

 $^{28}\text{Si}_{\text{all.}}$

Orbite N°	1	2	3	4	5	6
1	0,965		0,016			
2		0,942				
3	- 0,016		0,900			
4				0,100		
5					0,038	
6						0,059

TABLEAU 12

 $^{28}\text{Si}_{\text{sph.}}$

Orbite N°	1	2	3	4	5	6
1	0,817					
2		0,817				
3			0,817			
4				0,177		
5					0,186	
6						0,186

TABLEAU 13

 $^{28}\text{Si}_{\text{apl.}}$

Orbite N°	1	2	3	4	5	6
1	0,952					
2		0,981				
3			0,923			
4				0,073		
5					0,042	- 0,011
6					- 0,011	0,029

TABLEAU 14

 $^{32}\text{S}_{\text{sph.}}$

Orbite N°	1	2	3	4	5	6.
1	0,970					
2		0,912				
3			0,912			
4				0,912		
5					0,147	
6						0,147

TABLEAU 15

 ^{36}Ar

Orbite N°	1	2	3	4	5	6
1	0,996					
2		0,994			- 0,003	
3			0,990			
4				0,984		
5		- 0,003			0,987	
6						0,050

TABLEAU 16

Noyau	Forme		Niveau de Fermi	Lacune en énergie	L'énergie du premier état excité
^{20}Ne	allongée	H.F.	- 14,65	8,05	8,56
		"2p-2t"	- 14,34	7,73	7,78
^{24}Mg	allongée	H.F.	- 11,99	2,13	5,34
		"2p-2t"	- 12,05	2,48	5,36
^{28}Si	allongée	H.F.	- 14,75	5,46	7,08
		"2p-2t"	- 14,16	4,24	4,77
^{28}Si	aplatie	H.F.	- 15,06	6,71	8,55
		"2p-2t"	- 14,66	5,89	7,01
^{28}Si	sphérique	H.F.	- 14,41	4,23	3,24
		"2p-2t"	- 14,31	4,11	2,01
^{32}S	sphérique	H.F.	- 16,19	4,54	4,93
		"2p-2t"	- 16,32	4,76	5,05
^{36}Ar	aplatie	H.F.	- 14,84	4,67	5,51
		"2p-2t"	- 14,73	4,16	4,65

TABLEAU 17

	Noyau Quantité	$^{20}\text{Ne}_{\text{all.}}$	$^{24}\text{Mg}_{\text{all.}}$	$^{28}\text{Si}_{\text{all.}}$	$^{28}\text{Si}_{\text{apl.}}$	$^{28}\text{Si}_{\text{sph.}}$	$^{32}\text{S}_{\text{apl.}}$	$^{36}\text{Ar}_{\text{apl.}}$
H.F.	E_{HF}	- 35,89	- 73,17	- 122,50	- 123,47	- 114,54	- 168,64	- 221,33
	ΔE	- 0,26	- 3,75	- 1,19	- 1,27	- 6,52	- 4,71	- 0,34
	E_{TOT}	- 36,15	- 76,92	- 123,69	- 124,74	- 121,06	- 173,35	- 221,67
"2p-2t"	" E_{HF} "	- 35,87	- 73,42	- 122,03	- 123,21	- 114,37	- 168,75	- 221,28
	ΔE	- 0,28	- 3,55	- 1,53	- 1,53	- 6,59	- 4,60	- 0,42
	E_{TOT}	- 36,15	- 76,97	- 123,56	- 124,74	- 120,96	- 173,35	- 221,70
	S_{00}	0,018	0,074	0,113	0,085	0,329	0,176	0,033
	S_{01}	0,004	0,284	0,049	0,029	0,129	0,077	0,014
	S_{10}	0,001	0,027	0,012	0,013	0,019	0,009	0,000
	S_{11}	0,005	0,042	0,018	0,016	0,071	0,033	0,002
	S_{TOT}	0,028	0,427	0,192	0,144	0,548	0,295	0,049

TABLEAU 18

Noyau	Forme		Moment quadru- polaire
^{20}Ne	allongée	H.F.	3,927
		"2p-2t"	3,766
^{24}Mg	allongée	H.F.	4,868
		"2p-2t"	4,534
^{28}Si	allongée	H.F.	5,843
		"2p-2t"	5,105
^{28}Si	aplatie	H.F.	- 6,193
		"2p-2t"	- 5,373
^{36}Ar	aplatie	H.F.	- 4,498
		"2p-2t"	- 4,144

DEUXIEME THESE

Propositions données par la Faculté

Vu et approuvé

Orsay, le 9 décembre 1969

Le Doyen de la Faculté des Sciences
d'Orsay

G. POITOU

